The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	転炉における脱炭に対する流動-反応を連成した数値計算法の研究
Author(s)	山本, 哲也
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/88035
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

博士学位論文

転炉における脱炭に対する
流動–反応を連成した数値計算法の研究

山本哲也

2021 年 12 月

大阪大学大学院工学研究科
機械工学専攻

目次

第 1 章　緒言　1

1.1　本研究の目的と概要 1

1.2　本研究の背景 2

1.3　化学反応による物質伝達を伴う混相流に対する数値計算法と転炉への適用例 . 5

1.4　本論文の構成 9

第 2 章　数値計算法　11

2.1　化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法 11

2.2　脱炭反応モデル 21

2.3　アルゴリズムのまとめ 25

第 3 章　流体計算の妥当性評価　27

3.1　計算の概要 27

3.2　結果と考察 28

3.3　まとめ 44

第 4 章　脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算の妥当性評価　47

4.1　計算条件 47

4.2　結果と考察 49

4.3　まとめ 57

第 5 章　小型試験転炉における脱炭のシミュレーション　59

5.1　計算条件 59

5.2　結果と考察 61

5.3　まとめ 65

第 6 章　結言　67

付録　71

A　拡散項の離散化法 71

B　Eddy cell モデル 72

C Vreman モデル 72
D ジェットによって浴面に形成されるキャビティ深さに対する経験式 72

参考文献 75

記号表 85

関連発表文献 87

謝辞 89

第 1 章

緒言

1.1　本研究の目的と概要

転炉は鉄鋼プロセスの中で全体の生産性を左右する重要な工程の一つである．転炉の生産性を向上させるためには，不明点の多い炉内現象の解明が望まれる．高温の炉内の観察が難しいため，数値流体力学（CFD）を用いた解析が行われているが，転炉内現象は非常に複雑であり，全てを明らかにすることは困難である．特に，不明点の多いエマルジョンゾーン内の現象の解析は困難である．比較的，現象把握が進んでいる火点に対しても，解析手法が確立されておらず，圧縮性気液二相流の計算法，脱炭反応モデルに課題が残されている．

本研究では，転炉における火点での脱炭現象の解析を目的に，CFD を用いた化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法および脱炭反応モデルを提案した．まず，Thermo CIP-CUP 法 [1, 2] に基づく圧縮性気液二相流の計算法を，化学反応による物質伝達を考慮できるように拡張すると共に，非保存形の移流項の離散化法を改良した．具体的には，従来，CIP 法などのセミラグランジュスキームで離散化される非保存形の移流項を保存形の移流項とその他の部分に分けて離散化した．これにより，移流項に対する離散化手法の選択の自由度を高めると共に，非構造格子へ適用できるように拡張し，実用問題に対して有用な手法とした．次に，野村と森らの脱炭反応モデル [3] を参考にして，物質伝達速度と界面反応速度を考慮した反応モデルを構築し，圧縮性気液二相流の計算法と統合した．これにより，従来の CFD を用いた脱炭計算 [4, 5] とは異なり，物質伝達速度と界面反応速度の両方を脱炭速度の律速過程として考慮できるようにし，転炉での超音速 O_2 ジェットを用いた脱炭の解析に適用可能な計算法とした．

提案した流体計算の妥当性を評価するために，本計算法を用いて，化学反応および物質伝達を伴わない種々の流れに対する代表的な問題を解き，文献値と比較した，また，転炉に対する水モデル実験としてしばしば研究対象とされる高速ガスジェットの水浴への衝突 [6] を計算し，妥当な結果が得られるか確認した．そして，脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算に関して，溶鉄の脱炭についての要素実験 [3] における脱炭速度の再現性を確認し，妥当性を評価した．最後に，流動–反応を連成して，小型試験転炉における超音速 O_2 ジェットによる脱炭現象をシミュレートし，実現象の再現性について考察した．流動–反応を連成した転炉に

おける超音速 O_2 ジェットによる脱炭のシミュレーションはこれまでに例が無く，本研究で初めて実施したものである．

1.2　本研究の背景

1.2.1　鉄鋼プロセスの概要と転炉の役割

鉄鋼は建設，産業機械，自動車，造船，家電など幅広い産業で使用される現代社会に欠かせない素材である．2020 年の世界粗鋼生産量は 18 億 6400 万トン [7] であり，世界中で様々なものに加工されて人々に利用されている．

鉄鋼のプロセスフローを図 1.1 に示す．鉄鋼プロセスは，製銑プロセス（Ironmaking process），製鋼プロセス（Steelmaking process），圧延プロセス（Rolling process）の 3 つに大別される [8]．製銑プロセスでは，焼結炉（Sintering plant），コークス炉（Coke oven）を用いて，それぞれ原料である鉄鉱石・石灰石，石炭に予備処理が施される．鉄鉱石は大部分が粉状であるため，石灰石と混ぜ，焼結炉で焼き固めることによって一定の大きさの焼結鉱に加工される．石炭はコークス炉で乾留され，軟化溶融，再固化を経て強度の高いコークスに加工される．高炉（Blast furnace）では，炉頂から，焼結鉱，コークスが交互に層を作るように挿入され，炉下部の羽口から 1200 ˚C 程度の熱風空気が吹き込まれる．熱風はコークスと反応し，CO と N_2 の混合ガスとなる．混合ガスは，酸化鉄を還元しながら上昇し，炉頂から排出される．還元された鉄は溶融，滴下し，炭素濃度 3–4 mass% 程度の溶銑として炉底にたまり，溶融スラグと共に炉底側面の出銑孔から排出される．溶銑は溶銑樋にてスラグと比重分離され，トーピードカーで製鋼プロセスへ運搬される．

製鋼プロセスでは，転炉（Basic oxygen furnace）を用いて，溶銑から溶鋼を造る．溶銑は炭素濃度が約 2 mass% 以上の溶鉄であり，溶鋼は炭素濃度が約 2 mass% 未満の溶鉄である．溶銑を凝固させると靭性，可塑性が低い銑鉄となるのに対し，溶鋼を凝固させると靭性，可塑性が高くさまざまな製品に加工鋼鉄となる．転炉に，高炉で作られた溶銑およびスクラップを挿入した後，CaO を主成分とする副原料を添加し，炉底の羽口から Ar ガスを吹き込んで溶鉄浴を攪拌すると共に，上吹きランスから浴表面に大量の O_2 を吹き付ける．吹き付けられた O_2 により，溶鉄内の C，Si，Mn，P などの不純物が酸化され，CO およびスラグとして除去される．発生した CO は O_2 と再び反応し，燃焼熱により，溶鉄を加熱する．転炉により，4 mass% の C を含む約 1250˚C の溶銑は 0.04 mass% の C を含む約 1600˚C の溶鋼となる．転炉ではなく，電炉（Electric arc furnace）を用いてスクラップを溶解し，溶鋼を得る方法もある．転炉や電炉で造られた溶鋼に溶存している大量の O は，Al などの易酸化元素を添加することによって除去される．その後，RH（Ruhrstahl-Heraeus degasser）などの二次精錬装置にて，最終製品に応じて，合金元素が添加され，減圧下での更なる C の除去，S，H，N の除去が行われ，成分が調整される．連続鋳造機（Continuous casting machine）では，溶鋼中に浮遊している Al_2O_3，CaO，SiO_2 といった微小な不純物を浮上除去して，鋳型へ流し込み，水冷しながら引き抜くことにより，連続的に鋳造し，スラブと呼ばれる半製品を造る．

圧延プロセスでは，圧延機（Rolling mill）を用いて，スラブを加工し，最終製品を造る．スラブは，熱間・冷間で，圧延荷重や鋼材の温度履歴を制御しながら圧延される．これにより，鉄鋼組織が造り込まれ，引張強さ，耐力，伸び，硬さなどの所要の機械的特性が得られる．

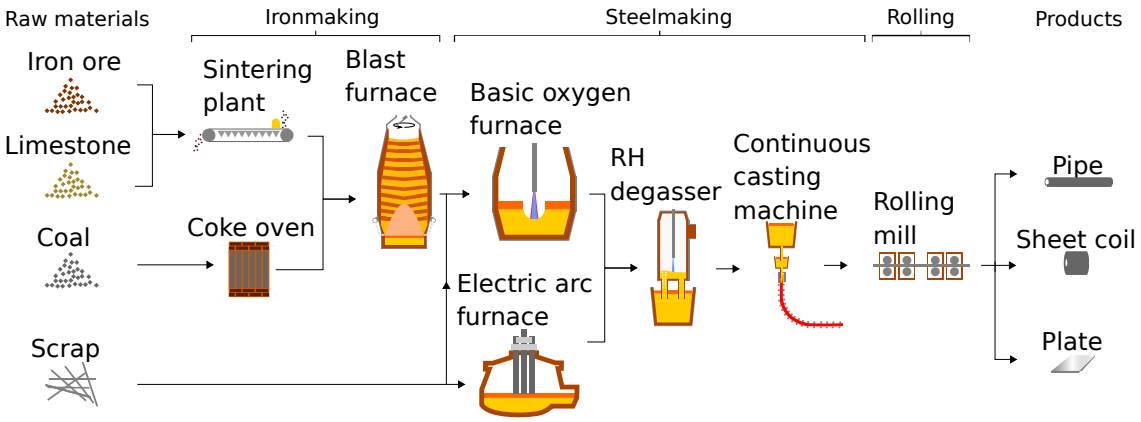


図 1.1: Process flow of steel [7]

図 1.2 に示すように，世界経済の発展と共に，鉄鋼の生産量は増加してきた．現在，溶鋼を得る方法として，高炉–転炉法と電炉法の 2 種類の方法が使われているが，鉄鋼生産量の約 70% を生産する高炉–転炉法が主流である．なお，転炉が実用化され広く普及される以前は，平炉（Open hearth furnace）と呼ばれる炉が用いられていた．転炉は平炉よりも圧倒的に生産性が高いため，2000 年頃までに平炉は転炉に置き換わった．

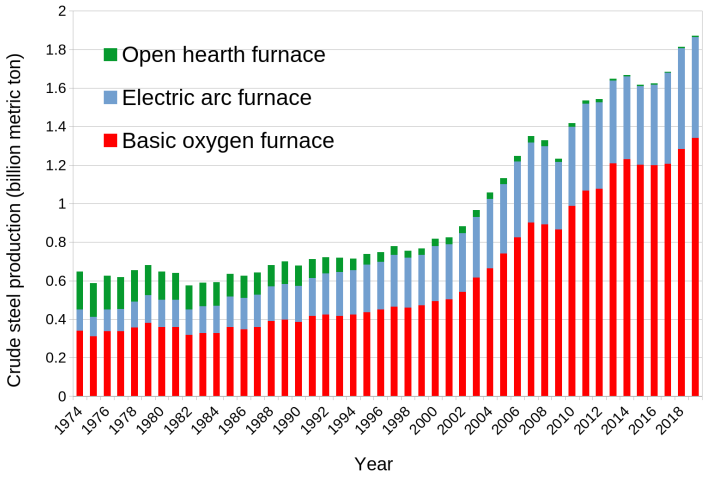


図 1.2: Trend of world crude steel production by process [7]

転炉は，現在主流の高炉–転炉法において欠かせない重要なプロセスであり，転炉の改善によって得られるメリットは非常に大きい．転炉の主要な役割は，溶銑中の C を除去（脱炭）し，溶鋼を造ることである．未だ不明点の多い脱炭現象を解明し，プロセス改善に繋げることが鉄鋼分野の重要な課題の一つである．

1.2.2　転炉内現象

図 1.3 に示すように，転炉では，超音速 O_2 ジェットを溶鉄浴に吹き付けることにより，C, Si, Mn, P などの溶鉄中の不純物を酸化除去する．転炉の主要な役割は脱炭であり，溶鉄中の炭素濃度が約 0.3 mass% 以上の時には，吹き込まれた酸素のほぼ全量が脱炭で消費される [9].

脱炭中の転炉内の温度は 2400 K を超えると推測されており [10]，観察・測定が困難である．数は非常に少ないが，転炉内を観察・測定した研究がいくつか報告されている [11, 12, 13]. 例えば，Sharma ら [12] は，側面の一部に石英ガラスを用いた炉に約 90 kg，炭素濃度 0.03–4.2 mass% の溶鉄を入れ，石英ガラスのある側面近傍の溶鉄浴に O_2 ジェットを吹き付けることによって，ジェットと溶鉄の衝突領域（火点）を観察した．火点は，ジェットによって形成された溶鉄浴面上の凹みに沿って化学反応による熱で輝き，その温度は 2000 K 以上であったと推定されている．また別途，溶鉄浴中の側壁，炉底に複数の熱電対を設置したうえで，O_2 ジェットを溶鉄浴に吹き付け，各熱電対で O_2 吹付け開始後の温度の時間推移が測定された．この温度測定により，高温の火点を起点とした溶鉄浴中の循環流の向きが推定された.

脱炭の主要な反応サイトは，エマルジョンゾーンと火点の 2 つであると考えられている．エマルジョンゾーンでは，ジェットの衝突によって生成された粒鉄，スラグ，CO ガスが混ざり合ってエマルジョン状態となっており，スラグに含まれる O と粒鉄中の C が反応するため，反応界面面積が大きいと考えられている．採取されたエマルジョン中の粒鉄の質量割合が実験的に調べられているが [14, 15]，エマルジョンゾーンにおける現象の詳細はよく分かっていない．一方，火点はジェットが溶鉄浴に衝突して形成されるキャビティ表面であり，高圧で高濃度の O_2 が供給されることから反応速度が大きいと考えられている．火点については，ジェットによって形成されるキャビティに関して数多くの研究がなされている．水，グリセリン，水銀などを用いた冷間試験 [6, 16, 17, 18, 19, 20] によって，ジェットの吹付け条件とキャビティ形状との関係が調べられている．また，水モデル実験 [20] や，溶鉄を使った実験 [21, 22, 23] において，飛散した水，溶鉄を解析することにより，超音速ガスジェットによって生成されたと推測される 0.1–10 mm オーダの微細なスプラッシュ液滴が実転炉の脱炭速度を増加させている可能性があることが指摘されている．しかしながら前述のように，実際の溶鉄を用いた実験では，高温のため直接観察が困難であり，火点での脱炭現象についてはよく分かっていない．このように，転炉内の脱炭現象に対して実験的な研究がなされてきたが，得られた情報は限定的である．そこで近年，次節で述べるように，化学反応による物質伝達を伴う混相流に対する数値計算法を用いて，脱炭などの現象をモデル化し，転炉内現象を解明しようとする試みが進められている.

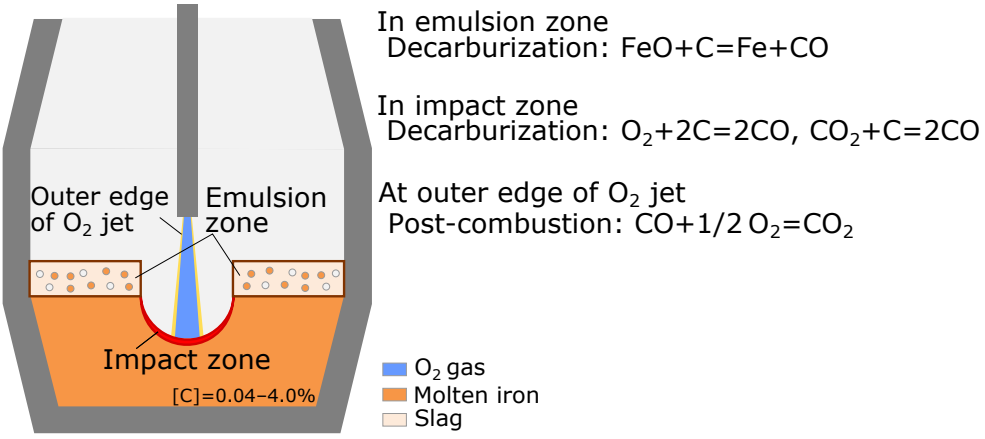


図 1.3: Overview of basic oxygen furnace process

1.3　化学反応による物質伝達を伴う混相流に対する数値計算法と転炉への適用例

1.3.1　プロセスシミュレーションモデルによる計算法

化学工学の分野では，反応容器の設計を目的に，反応容器内の流動状態を単純化することにより，化学反応を伴う気液間の物質伝達が解析されている [24]．反応容器の設計においては，反応容器内の流動状態を，押し出し流れ，完全混合流れなどと仮定することにより，流れの支配方程式を解くこと無く，反応容器の反応効率が見積られる．そして，気液間の物質伝達速度は，各相の物質伝達係数と化学反応の反応速度を考慮して求められる．これらのモデルを用いて実際の反応容器を解析する際には，反応容器内の各部を，押し出し流れ部，完全混合流れ部，ならびに流体の停滞部で表現し，バイパス，リサイクルなどのモデルでそれらの結合状態を表現することによって，反応容器全体の流れをモデル化する．各部の結合度合いは，トレーサー応答実験結果を再現できるように決められる．また，これらのモデルでは，各相の物質伝達係数も実験結果を再現できるように決められる．

1.3.2　プロセスシミュレーションモデルを用いた転炉のシミュレーション

プロセスシミュレーションモデルを用いて，転炉内を火点やエマルジョンゾーンなどといった複数の反応ゾーンに分けて解析する研究が行われている [25, 26, 27, 28]．これらの研究では，反応速度を計算するのに必要な物質伝達係数と界面面積を経験式によって評価している．経験式は，数少ない実験から得られたデータに基づいているため，汎用性が高いとは言えない．モデルは，操業データを用いて，経験式に含まれるパラメータを調整したうえで用いられることが多い．プロセスシミュレーションモデルは，転炉操業を改善するには有用である．しかしながら，流れの支配方程式を解かないため，流れ，温度，化学種の分布などの詳細な情報を得ることはできず，転炉内の複雑な動力学を解明できない．

1.3.3　数値流体力学モデルによる計算法

化学反応モデルによって反応速度を算出できれば，混相流の計算法と物質伝達の計算法を組み合わせることにより，化学反応による物質伝達を伴う混相流の計算が可能である．

混相流の計算法は，相界面構造を表現しない混合・多流体モデルと相界面構造を表現する界面追跡・捕獲モデルに大別される [29]．混合・多流体モデルでは，流体を時間・空間的に平均化して扱うために相界面構造の情報は消えてしまう．一方，界面追跡・捕獲モデルでは，各相を識別する量を定義し，相界面を直接，または間接的に表現して扱う．転炉での脱炭においては，火点の界面形状が重要であるため，ここでは，界面追跡・捕獲モデルについてのみ扱い，混相流の中でも気液二相流に限定して述べる．

転炉では，超音速ジェットが用いられるため，流体の圧縮性を考慮する必要がある．また，脱炭反応に伴う気相体積の変化も考慮しなければならない．以下で，これらの数値計算法について概説し，転炉への適用例について述べる．

界面追跡・捕獲モデルによる気液二相流の計算法

界面追跡・捕獲モデルによる気液二相流の計算法として，1970–90 年頃に，arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) 法 [30]，volume of fluid (VOF) 法 [31]，front-tracking (FT) 法 [32] などの基礎的な手法が提案された．これら手法の中でも特に VOF 法は，大変形を伴う界面を比較的容易に扱えることから，気泡流 [33]，液滴の微粒化 [34]，砕波 [35] など広く気液二相流の計算に用いられている．

VOF 法による気液二相流の計算法は，もともと，非圧縮性流体の仮定の下に構築されていたが，近年，圧縮性流体にまで計算法を拡張する研究が進められている．矢部ら [36] は圧縮性流体と非圧縮性流体が共存する気液二相流に対する圧力ベースの統一解法 (CIP-CUP 法) を提案した．CIP-CUP 法は，従来の単相流に対する圧力ベースの統一解法 [37, 38] とは異なり，気相–液相間が高密度比であることに起因する不安定性を解消するために，非保存形の質量保存式から導出される圧力方程式を解く．CIP-CUP 法は，姫野らによって，熱流体解析により適した形式 (Thermo CIP-CUP 法) へ修正されている [1, 2, 39, 40]．Thermo CIP-CUP 法などの CIP-CUP 法に基づいた圧力ベースの統一解法は，宇宙船内の液体燃料のスロッシング [41] やディーゼルエンジンの液体燃料の噴霧 [42] など様々な流れに対して適用されている．

圧縮性気液二相流に対する計算法は，まだ発展途上であり，実プロセスの計算に用いるにはいくつか課題がある．CIP-CUP 法に基づく計算法は，非保存形の移流項の離散化に Cubic Interpolated Propagation (CIP) スキームなどのセミラグランジュスキームを用いることを前提としており，超音速の圧縮性流れ や近年乱流モデルとして広く用いられている large eddy simulation (LES) における信頼性が確認されていない．また，実プロセスの計算において，しばしば複雑形状を扱うために用いられる任意多面体格子からなる非構造格子への拡張もされていない．

物質伝達の計算法

計算法の基礎となるのは，気相，液相における化学種の濃度の取り扱いである．Davidson と Rudman [43] は，反応を伴わない単一気泡の溶解に対し，気相，液相それぞれに濃度を定義する two-scalar 法を提案した．気相，液相で共通した濃度を用いると，通常，数値拡散により界面を超えて濃度が拡散し，数値的な物質伝達が生じてしまうが，two-scalar 法により，この問題が解決された．多くの研究では，精度良く物質伝達速度を計算するために，two-scalar 法が用いられている．

大きな反応速度を持つ場合に，物質伝達による気相体積の変化が重要となる．気相体積の変化は，主に，蒸発や沸騰などの相変化を伴う物質伝達を対象として研究されており [44, 45]，計算手法はおおむね確立されている．相変化による物質伝達ではない系を対象として，気相体積の変化を考慮した例は少ないが，Fleckenstein と Bothe [46] によって，酸素と窒素が溶存した水の中を浮上する二酸化炭素気泡の溶解計算が報告されている．物質伝達による気相体積の変化を考慮し，気泡体積が初期体積の半分以下にまで減少するまでの計算が実施されており，大きな体積変化を扱えることが示されている．

化学反応による物質伝達を伴い静水圧変化を受けながら上昇する気泡において，密度変化を考慮することの重要性が指摘されているが [47]，実際に密度変化を考慮した研究は少なく，島田らの報告 [48] のみである．島田らは，密度の温度・圧力依存性を考慮した気液二相流の計算法 [49] を反応を伴う物質伝達を扱えるよう拡張し，水酸化ナトリウム水溶液への二酸化炭素の吸収を計算した．しかしながら，島田らの計算法では，密度の圧力依存性を考慮する際に，圧力の時間変化項が無視されており，超音速ガスジェットを伴う転炉へ適用できない．ANSYS Fluent [50] など一部の商用の流体解析ソフトウェアには，化学反応による物質伝達を考慮して圧縮性流体を扱える気液二相流の計算機能が搭載されているが，計算法の詳細は不明であり，拡張性には限界がある．

1.3.4　数値流体力学モデルを用いた転炉のシミュレーション

近年，CFD を用いて，転炉内の詳細な流れ，流れが脱炭反応に与える影響，そのメカニズム解明に向けた研究が進められている．第 1.2.2 節で概説したように，脱炭の主要な反応サイトはエマルジョンゾーンと火点であると推測されている．エマルジョンゾーンについては実験的な現象把握が進んでおらず，CFD でモデル化することが困難である．したがって，比較的，実験的な現象把握が進んでいる火点での現象に着目して，CFD を用いた研究が行われている．

高速ガスジェットによって形成されるキャビティに関して，数多くの研究がなされている．水モデル実験結果と比較することにより，CFD によるキャビティ形状の再現性が評価されている [51, 52, 53, 54, 55]．例えば，安藤ら [54] は，乱流モデルに Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) モデルの一種の Realizable k-ϵ モデル [56] を適用した VOF 法により，水面から 30 mm 上に設置された出口径 0.5 mm のノズルから水面に吹きつけられた高速ガスジェット [6] を計算した．彼らはジェットの噴出速度が亜音速–超音速の幅広い条件で，

キャビティ深さが実験結果と良く一致することを確認した．また，中村ら [55] は，乱流モデルに LES モデルの一種の標準 Smagorinsky モデル [57] を用いた VOF 法により，安藤らと同じ水モデル実験 [6] を計算し，キャビティ深さだけでなく，キャビティ径も実験結果と良く一致することを確認した．溶鉄浴に対するシミュレーションも実施されている [58, 59]．例えば，Li ら [59] は，超音速ガスジェット，溶鉄，スラグの相互作用を考慮して，商用の流体解析ソフトウェア ANSYS Fluent を使い，乱流モデルに RANS モデルの一種である標準 k-ϵ モデル [60] を用いた VOF 法を用いて，転炉のキャビティ形状を予測している．これらのシミュレーションでは，化学反応は考慮されていないが，実転炉のシミュレーションの可能性が見いだされている．

これまでにいくつか火点における化学反応を考慮した研究が行われているが，モデルの確立には至っていない．CO_2 による脱炭のみを考慮した研究および O_2 による脱炭（$O_2 + 2\,C = 2\,CO$）とそれに付随して生じる CO_2 による脱炭（$CO_2 + C = 2\,CO$），二次燃焼（$CO + 1/2O_2 = CO_2$）を考慮した研究がなされてきた．O_2 による脱炭実験では，CO_2 による脱炭と二次燃焼も生じるため，それぞれの反応速度を求められないのに対し，CO_2 による脱炭実験では，CO_2 の反応速度を求められるため，脱炭反応モデルの詳細な検証が可能である．

CO_2 による脱炭に対して，Cho ら [4] と Gao ら [5] によって，モデルが提案されている．これらのモデルは，実験的に得られた脱炭速度との比較によって検証されているが，不十分な点がある．実験的には，物質伝達速度と界面反応速度の両方が脱炭反応速度を律速すると推定されているが [3, 61]，いずれのモデルも，両方を同時には考慮していない．Cho らのモデルは，気液界面近傍の気相の境界層における物質伝達速度のみ，Gao らのモデルは，界面反応速度のみが脱炭反応速度を律速すると仮定している．また，O_2 と CO の対向流における燃焼に関するモデル実験 [62] から転炉内には高 CO_2 濃度となる領域が存在すると推測されているが，彼らのモデルは共に，そのような高 CO_2 濃度となる条件では検証されていない．

O_2 による脱炭に対して，これまでに，加藤ら [63]，古賀ら [64]，Ersson ら [65] によってモデルが提案されている．加藤ら [63] は，火点での脱炭を単純な物質伝達として考慮し，気相のみの単相流としてモデル化した軸対称系の計算により，二次燃焼を調べた．彼らは，キャビティを固定形状として与え，物質伝達係数を実験データに基づいて調整することにより，二次燃焼における酸素の消費割合（二次燃焼率）の酸素流量に対する依存性および二次燃焼率のランス出口–溶鉄浴間の距離に対する依存性が実験結果と比較的良く一致することを示した．加藤らとは異なり，古賀ら [64] と Ersson ら [65] は溶鉄の界面形状を気液二相流モデルを用いて計算した．古賀ら [64] は，気液二相流を考慮した格子ボルツマン法を用いて，2 次元系の計算を実施し，二次燃焼を調べた．彼らのモデルでは，溶鉄界面全体から一定速度で CO ガスが発生するとして脱炭反応がモデル化された．Ersson ら [65] は，CFD と計算熱力学を組み合わせた手法を用い，脱炭と二次燃焼だけでなく，Si，Mn，P の酸化も考慮して，O_2 ジェットによる溶鉄の精錬を軸対称系で計算した．しかしながら，古賀らや Ersson らの計算条件は，O_2 ジェットの速度が遅く超音速ではない，炉の大きさが 2–3 オーダ小さいことなど，実際の転炉とは大きく異なる部分があり，彼らの結果から転炉における脱炭の詳細を推測することは困難

である．またさらに，これらの研究における脱炭反応モデルは，それぞれ，溶鉄界面の非定常な変形が考慮されていない [63]，脱炭反応の熱力学が考慮されていない [64]，界面の境界層における物質伝達速度が考慮されていない [65] ことから，適切にモデル化されているとはいえない．実転炉の脱炭現象の動力学を解明するためには，実転炉と同じオーダのスケールで，超音速 O_2 ジェットを考慮し，適切な脱炭反応モデルを用いて流動–反応を連成したシミュレーションが望まれる．

1.4　本論文の構成

本論文の各章の構成は以下の通りである．第 2 章で数値計算法を提案する．第 3 章では，提案した数値計算法により，化学反応および物質伝達を伴わない圧縮性単相流，非圧縮性乱流，非圧縮性気液二相流の種々の流れに対する代表的な問題を解き，流体計算の妥当性を評価する．さらに，転炉に対する水モデル実験として，上野らによって調査された水浴に衝突する高速ガスジェット [6] を計算し，測定結果と比較することで，圧縮性気液二相流に対する計算の妥当性を確認する．第 4 章では，本計算法を用いて，野村と森 [3] による坩堝内での CO_2 ジェットによる溶鉄の脱炭実験における脱炭速度を計算し，測定結果と比較することで，脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成に関する妥当性を評価する．第 5 章では，本計算法を用いて，実機の 1/5 スケールの小型試験転炉における超音速 O_2 ジェットによる脱炭現象を計算し，スラグが無い状態での高炭素濃度の溶鉄浴に対する火点での脱炭を予測し，実現象の再現性について考察する．第 6 章では，得られた結果を総括し，今後の展開について述べる．

第 2 章

数値計算法

本章では，転炉における脱炭現象を扱うための数値計算法の詳細を述べる．化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法，脱炭反応モデルについて述べ，全体のアルゴリズムについてまとめる．化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法においては，化学反応による物質伝達を考慮できるように，Thermo CIP-CUP 法 [1, 2] に基づく圧縮性気液二相流の計算法を拡張すると共に，非保存形の移流項の離散化法を改良する．脱炭反応モデルにおいては，野村と森らの脱炭反応モデル [3] を参考にして，物質伝達速度と界面反応速度を考慮した反応モデルを構築し，圧縮性気液二相流の計算法と統合する．

2.1 化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法

2.1.1 基礎方程式

気液二相流の基礎方程式

気液界面の捕獲に VOF 法 [31] を用いて，化学反応による物質伝達，気相中の反応，気相の圧縮性を考慮した気液二相流の基礎方程式を導出する．

VOF 法では，相識別関数のセル内の体積平均値で定義されるカラー関数を用いて陰的に相界面を表現する [66]．例えば，液相 l の相識別関数 $H_{\mathrm{l}}\,(-)$ を以下で定義すると，

$$H_{\mathrm{l}} = \begin{cases} 1 & \text{in liquid phase} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \tag{2.1}$$

液相のカラー関数 $\alpha_{\mathrm{l}}\,(-)$ は以下となり，セル内の液相の体積分率と等しくなる．

$$\alpha_{\mathrm{l}} = \frac{1}{V}\int_{\Omega} H_{\mathrm{l}} dV \tag{2.2}$$

ここで，セル空間 Ω，セル体積 $V\,(\mathrm{m}^3)$ である．気相 g に対しても同様に，識別関数 H_{g}，カラー関数 α_{g} が定義される．α_{l} と α_{g} には $\alpha_{\mathrm{l}} + \alpha_{\mathrm{g}} = 1$ の関係があるため，液相中のセルのカラー関数の値は，$\alpha_{\mathrm{l}} = 1$，$\alpha_{\mathrm{g}} = 0$，気相中のセルのカラー関数の値は，$\alpha_{\mathrm{g}} = 1$，$\alpha_{\mathrm{l}} = 0$ となる．そして，気液界面を含むセルのカラー関数の値は，$0 < \alpha_{\mathrm{l}} < 1$，$0 < \alpha_{\mathrm{g}} < 1$ となり，カ

ラー関数を用いて，陰的に気液界面が表現される．下付き添字 l，g はそれぞれ液相，気相の量であることを表す．

カラー関数が体積分率と等しくなるため，VOF 法の基礎方程式は，気液二相流の混合モデルの一つである均質流モデルの基礎方程式と等しい [67]．気液間の反応を考慮したときの均質流モデルの基礎方程式は下記である [67, 68]．

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{l}}\alpha_{\mathrm{l}}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho_{\mathrm{l}}\alpha_{\mathrm{l}}\boldsymbol{U}) = \mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}} \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{g}}\alpha_{\mathrm{g}}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho_{\mathrm{g}}\alpha_{\mathrm{g}}\boldsymbol{U}) = \mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}} \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial \rho\boldsymbol{U}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}) = -\nabla p - \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} + \rho\nabla G + \boldsymbol{F}_{\mathrm{s}} \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho h\boldsymbol{U}) = -\frac{\partial p}{\partial t} + \boldsymbol{U}\cdot\nabla p - \nabla\cdot\boldsymbol{q} - \boldsymbol{\tau}:\nabla\boldsymbol{U} + Q_{\mathrm{l\text{–}g}} + Q_{\mathrm{g}} \tag{2.6}$$

ここで, 時刻 $t\,(\mathrm{s})$, 密度 $\rho\,(\mathrm{kg\,m^{-3}})$, 速度 $\boldsymbol{U}\,(\mathrm{m\,s^{-1}})$, 圧力 $p\,(\mathrm{Pa})$, 比エンタルピー $h\,(\mathrm{J\,kg^{-1}})$, 化学反応による質量変化速度 $\mathcal{R}\,(\mathrm{kg\,m^{-3}\,s^{-1}})$，粘性応力 $\boldsymbol{\tau}\,(\mathrm{Pa})$，重力ポテンシャル $G\,(\mathrm{m^2\,s^{-2}})$，界面張力による体積力 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{s}}\,(\mathrm{N\,m^{-3}})$，熱流束 $\boldsymbol{q}\,(\mathrm{J\,m^{-2}\,s^{-1}})$，化学反応による熱発生速度 $Q\,(\mathrm{J\,m^{-3}\,s^{-1}})$ である．下付き添え字の無い密度 ρ は，相平均化された密度であり，算出方法は後述する．下付き添字 l–g は気液間の化学反応に起因する量であることを表す．

two-scalar 法 [43] に従い，気相中の化学種と液相中の化学種をそれぞれ別個に扱うよう化学種の質量保存式を定式化する．計算領域全体でそれぞれの相に対する化学種の質量分率を定義すると，式 (2.3)，(2.4) と同様にして，下記の化学種の質量保存方程式が導かれる．

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{l}}\alpha_{\mathrm{l}}Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho_{\mathrm{l}}\alpha_{\mathrm{l}}Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}}\boldsymbol{U}) = -\nabla\cdot\boldsymbol{j}_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} \tag{2.7}$$

$$\frac{\partial \rho_{\mathrm{g}}\alpha_{\mathrm{g}}Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho_{\mathrm{g}}\alpha_{\mathrm{g}}Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}\boldsymbol{U}) = -\nabla\cdot\boldsymbol{j}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} \tag{2.8}$$

ここで，化学種の質量分率 $Y\,(-)$，化学種の拡散流束 $\boldsymbol{j}\,(\mathrm{kg\,m^{-2}\,s^{-1}})$ であり，上付き添字 X は，化学種 X の量であることを表す．質量変化速度 $\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}}$ は液相–気相間反応による液相中の化学種 X の質量変化速度，$\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}}$ は液相–気相間反応による気相中の化学種 X の質量変化速度，$\mathcal{R}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}$ は気相中の反応による気相中の化学種 X の質量変化速度である．各相の質量保存式 (2.3)，(2.4) を用いて，化学種の質量保存式を非保存形に変形すると，下記のようになる．

$$\rho_{\mathrm{l}}\alpha_{\mathrm{l}}\frac{\mathrm{D}Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}}}{\mathrm{D}t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{j}_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} - Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}}\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}$$

$$\rho_{\mathrm{g}}\alpha_{\mathrm{g}}\frac{\mathrm{D}Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}}{\mathrm{D}t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{j}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} - Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}$$

文献 [69] に従い，比エンタルピーを用いたエネルギー方程式から温度を用いたエネルギー方程式へ変換すると，下記のエネルギー保存式が導かれる．

$$C_{\mathrm{p}}\left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho T\boldsymbol{U})\right) = \beta T\frac{\mathrm{D}p}{\mathrm{D}t} - \nabla\cdot\boldsymbol{q} - \boldsymbol{\tau}:\nabla\boldsymbol{U} + Q_{\mathrm{l\text{–}g}} + Q_{\mathrm{g}} \tag{2.9}$$

ここで，定圧比熱 $C_\mathrm{p}\,(\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}})$，体膨張係数 $\beta\,(\mathrm{K^{-1}})$，物質微分 $\mathrm{D}/\mathrm{D}t\,(\mathrm{s^{-1}})$ である．

各相の質量保存式 (2.3)，(2.4) を足し合わせ，関係式 $\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}} + \mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}} = 0$ を用いると，下記の質量保存式となる．

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{U}) = 0 \tag{2.10}$$

質量保存式 (2.10) を用いて，運動量保存式 (2.5)，エネルギー保存式 (2.9) を非保存形に変形すると下記のようになる．

$$\begin{aligned}
\rho \frac{\mathrm{D}\boldsymbol{U}}{\mathrm{D}t} &= -\nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \nabla G + \boldsymbol{F}_\mathrm{s} \\
\rho C_\mathrm{p} \frac{\mathrm{D}T}{\mathrm{D}t} &= \beta T \frac{\mathrm{D}p}{\mathrm{D}t} - \nabla \cdot \boldsymbol{q} - \boldsymbol{\tau} : \nabla \boldsymbol{U} + Q_\mathrm{l\text{–}g} + Q_\mathrm{g}
\end{aligned}$$

質量保存式とカラー関数の輸送方程式は，各相の質量保存式 (2.3)，(2.4) から導出される．各相の質量保存式 (2.3)，(2.4) を変形すると下記のようになる．

$$\frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{l}\alpha_\mathrm{l}}{\mathrm{D}t} = -\rho_\mathrm{l}\alpha_\mathrm{l} \nabla \cdot \boldsymbol{U} + \mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}} \tag{2.11}$$

$$\frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{g}\alpha_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t} = -\rho_\mathrm{g}\alpha_\mathrm{g} \nabla \cdot \boldsymbol{U} + \mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}} \tag{2.12}$$

関係式 $\alpha_\mathrm{l} + \alpha_\mathrm{g} = 1$ を使うと，式 (2.11) と式 (2.12) から以下の式が導かれる．

$$-\left(\frac{1}{\rho_\mathrm{l}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{l}\alpha_\mathrm{l}}{\mathrm{D}t} + \frac{1}{\rho_\mathrm{g}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{g}\alpha_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t} \right) + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}}{\rho_\mathrm{l}} + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}}{\rho_\mathrm{g}} = \nabla \cdot \boldsymbol{U} \tag{2.13}$$

式 (2.13) の左辺第 1 項は以下のように変形できる．

$$\begin{aligned}
-\left(\frac{1}{\rho_\mathrm{l}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{l}\alpha_\mathrm{l}}{\mathrm{D}t} + \frac{1}{\rho_\mathrm{g}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{g}\alpha_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t} \right) &= -\left(\frac{\alpha_\mathrm{l}}{\rho_\mathrm{l}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{l}}{\mathrm{D}t} + \frac{\mathrm{D}\alpha_\mathrm{l}}{\mathrm{D}t} + \frac{\alpha_\mathrm{g}}{\rho_\mathrm{g}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t} + \frac{\mathrm{D}\alpha_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t} \right) \\
&= -\frac{\alpha_\mathrm{l}}{\rho_\mathrm{l}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{l}}{\mathrm{D}t} - \frac{\alpha_\mathrm{g}}{\rho_\mathrm{g}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t}
\end{aligned} \tag{2.14}$$

ここで，$\alpha_\mathrm{l} + \alpha_\mathrm{g} = 1$ を使った．液相が非圧縮の時 $(\mathrm{D}\rho_\mathrm{l}/\mathrm{D}t = 0)$，式 (2.14) を式 (2.13) に代入すると，質量保存式

$$\nabla \cdot \boldsymbol{U} = -\frac{\alpha_\mathrm{g}}{\rho_\mathrm{g}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t} + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}}{\rho_\mathrm{l}} + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}}{\rho_\mathrm{g}}$$

が導かれる．そして，質量保存式を式 (2.11) に代入すると，カラー関数の輸送方程式

$$\frac{\mathrm{D}\alpha_\mathrm{l}}{\mathrm{D}t} = \alpha_\mathrm{l} \frac{\alpha_\mathrm{g}}{\rho_\mathrm{g}} \frac{\mathrm{D}\rho_\mathrm{g}}{\mathrm{D}t} + \alpha_\mathrm{g} \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}}{\rho_\mathrm{l}} - \alpha_\mathrm{l} \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}}{\rho_\mathrm{g}}$$

が導かれる．ここで，$\mathrm{D}\rho_\mathrm{l}/\mathrm{D}t = 0$ を使った．

気液二相流の基礎方程式をまとめると，以下のようになる．

- カラー関数の輸送方程式

$$\frac{\mathrm{D}\alpha_{\mathrm{l}}}{\mathrm{D}t} = \alpha_{\mathrm{l}}\frac{\alpha_{\mathrm{g}}}{\rho_{\mathrm{g}}}\frac{\mathrm{D}\rho_{\mathrm{g}}}{\mathrm{D}t} + \alpha_{\mathrm{g}}\frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}}{\rho_{\mathrm{l}}} - \alpha_{\mathrm{l}}\frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}}{\rho_{\mathrm{g}}} \tag{2.15}$$

- 液相，気相における化学種の質量保存式

$$\rho_{\mathrm{l}}\alpha_{\mathrm{l}}\frac{\mathrm{D}Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}}}{\mathrm{D}t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{j}_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} - Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}}\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}} \tag{2.16}$$

$$\rho_{\mathrm{g}}\alpha_{\mathrm{g}}\frac{\mathrm{D}Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}}{\mathrm{D}t} = -\nabla\cdot\boldsymbol{j}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} + \mathcal{R}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} - Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}} \tag{2.17}$$

- 質量保存式

$$\nabla\cdot\boldsymbol{U} = -\frac{\alpha_{\mathrm{g}}}{\rho_{\mathrm{g}}}\frac{\mathrm{D}\rho_{\mathrm{g}}}{\mathrm{D}t} + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}}{\rho_{\mathrm{l}}} + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}}{\rho_{\mathrm{g}}} \tag{2.18}$$

- 運動量保存式

$$\rho\frac{\mathrm{D}\boldsymbol{U}}{\mathrm{D}t} = -\nabla p - \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} + \rho\nabla G + \boldsymbol{F}_{\mathrm{s}} \tag{2.19}$$

- エネルギー保存式

$$\rho C_{\mathrm{p}}\frac{\mathrm{D}T}{\mathrm{D}t} = \beta T\frac{\mathrm{D}p}{\mathrm{D}t} - \nabla\cdot\boldsymbol{q} - \boldsymbol{\tau}:\nabla\boldsymbol{U} + Q_{\mathrm{l\text{–}g}} + Q_{\mathrm{g}} \tag{2.20}$$

方程式中の変数間には，以下の関係がある．

$$\alpha_{\mathrm{l}} + \alpha_{\mathrm{g}} = 1 \tag{2.21}$$

$$\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}} = \sum_{\mathrm{X}}\mathcal{R}_{\mathrm{l,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} \tag{2.22}$$

$$\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}} = \sum_{\mathrm{X}}\mathcal{R}_{\mathrm{g,l\text{–}g}}^{\mathrm{X}} \tag{2.23}$$

$$\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}} + \mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}} = 0 \tag{2.24}$$

これらの基礎式だけでは，気相の密度 ρ_{g} は決まらないが，後述するように，状態方程式によって ρ_{g} は圧力，温度，化学種の質量分率と結び付けられる．

基礎方程式 (2.15)–(2.20) は，化学種の計算で重要となる質量保存性を向上させるために，圧縮性気液二相流に対する解法の一つである Thermo CIP-CUP 法で用いられる基礎方程式 [2] に対して，質量保存式の形を変更したものである．質量保存式およびそれに関連するカラー関数の輸送方程式は Thermo CIP-CUP 法のものとは異なる．Thermo CIP-CUP 法では，質量保存式は，以下の関係式を用いて，変形されている．

$$\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t} = \left(\frac{\partial\rho}{\partial p}\right)_T\frac{\mathrm{D}p}{\mathrm{D}t} + \left(\frac{\partial\rho}{\partial T}\right)_p\frac{\mathrm{D}T}{\mathrm{D}t} \tag{2.25}$$

式 (2.25) は，時間，空間的に離散化した場合には成立しないため，質量保存性が悪くなる可能性がある．したがって，本手法では，関係式 (2.25) を用いずに，基礎方程式を定式化した．Thermo CIP-CUP 法は，化学種を扱うことが出来るようには拡張されていないため，化学種の質量保存式は新たに定式化した．

構成方程式と物性値

化学種の質量，運動量，エネルギーの保存式にそれぞれフィックの法則，ニュートンの法則，フーリエの法則を用い，渦拡散モデルで乱流の効果を考慮すると，化学種の拡散流束，応力，熱流束は以下の式で表される [70].

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}} = -\rho_{\mathrm{l}}\alpha_{\mathrm{l}}D_{\mathrm{l,\,eff}}^{\mathrm{X}}\nabla Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}} \tag{2.26}$$

$$D_{\mathrm{l,\,eff}}^{\mathrm{X}} = D_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}} + D_{\mathrm{t}} \tag{2.27}$$

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} = -\rho_{\mathrm{g}}\alpha_{\mathrm{g}}D_{\mathrm{g,\,eff}}^{\mathrm{X}}\nabla Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} \tag{2.28}$$

$$D_{\mathrm{g,\,eff}}^{\mathrm{X}} = D_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} + D_{\mathrm{t}} \tag{2.29}$$

$$\boldsymbol{\tau} = -\mu_{\mathrm{eff}}\left(\nabla\boldsymbol{U} + (\nabla\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}} - \frac{2}{3}(\nabla\cdot\boldsymbol{U})\boldsymbol{I}\right) \tag{2.30}$$

$$\mu_{\mathrm{eff}} = \mu + \mu_{\mathrm{t}} \tag{2.31}$$

$$q = -\lambda_{\mathrm{eff}}\nabla T \tag{2.32}$$

$$\lambda_{\mathrm{eff}} = \lambda + \lambda_{\mathrm{t}} \tag{2.33}$$

ここで，拡散係数 $D\,(\mathrm{m^2\,s^{-1}})$，粘性係数 $\mu\,(\mathrm{Pa\,s})$，熱伝導率 $\lambda\,(\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}})$ であり，下付き添字 t は乱流に起因する量であることを表す．乱流に起因する量は，気相，液相でそれぞれ別個の値を持つのではなく，気相，液相で共通の値を持つとして扱った．渦粘性係数 μ_{t} は，LES, RANS モデルなどの乱流モデルによって計算される．渦拡散係数，渦熱伝導率は，乱流シュミット数 $\mathrm{Sc_t}\,(-)$，乱流プラントル数 $\mathrm{Pr_t}\,(-)$ および，渦動粘性係数 $\nu_{\mathrm{t}} = \mu_{\mathrm{t}}/\rho\,(\mathrm{m^2\,s^{-1}})$ を用いて，$D_{\mathrm{t}} = \nu_{\mathrm{t}}/\mathrm{Sc_t}$，$\lambda_{\mathrm{t}} = \nu_{\mathrm{t}}/\mathrm{Pr_t}$ と計算される．乱流シュミット数と乱流プラントル数は定数とし，$\mathrm{Sc_t} = 0.7$，$\mathrm{Pr_t} = 1.0$ とした．

物性値は以下の式のようにカラー関数で平均化して，扱われる．

$$\phi = \alpha_{\mathrm{l}}\phi_{\mathrm{l}} + \alpha_{\mathrm{g}}\phi_{\mathrm{g}} \tag{2.34}$$

ここで，ϕ は ρ，μ，λ，ρC_{p}，β のいずれかである．

第 3，4，5 章で述べる計算では，各物性値を以下のように与えた．液相の密度は変化しないとし，気相には理想気体の状態方程式を用い，液相と気相の密度をそれぞれ以下の式で表した．

$$\rho_{\mathrm{l}} = \rho_{\mathrm{l,\,0}} \tag{2.35}$$

$$\rho_{\mathrm{g}} = \frac{p}{R_{\mathrm{g}}T} \tag{2.36}$$

液相が水の場合，$\rho_{\mathrm{l,\,0}} = 995\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$，液相が溶鉄の場合，$\rho_{\mathrm{l,\,0}} = 7000\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$ を与えた [71]．式 (2.36) 中の混合ガスの気体定数 $R_{\mathrm{g}}\,(\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}})$ は $R_{\mathrm{g}} = \sum_{\mathrm{X}} Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}\mathrm{R}/M_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}}$ で計算され，化学種の質量分率に依存する．ここで，気体定数 $\mathrm{R} = 8.314472\,\mathrm{J\,K^{-1}\,mol^{-1}}$，モル質量 $M\,(\mathrm{kg\,mol^{-1}})$ である． 液相中の化学種 X の拡散係数は一定とし，$D_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X}} = D_{\mathrm{l}} = D_{\mathrm{l,\,0}}$ とした．本研究では，液相を溶鉄として脱炭を計算する場合にのみ液相中の拡散係数を考慮した．溶鉄の拡散係数は，$D_{\mathrm{l,\,0}} = 7.0\times10^{-9}\,\mathrm{m^2\,s^{-2}}$ [72] とした．気相中の拡散係数は

Fuller-Schettler-Giddings correlation [73] を用い，次式で求めた．

$$D_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X,\,Y}} = \frac{1.1325 \times 10^{-2} T^{1.75} \left(1/W_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} + 1/W_{\mathrm{g}}^{\mathrm{Y}}\right)^{1/2}}{p[(v^{\mathrm{X}})^{1/3} + (v^{\mathrm{Y}})^{1/3}]^{1/2}} \tag{2.37}$$

ここで，化学種 X と Y の相互拡散係数 $D_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X,\,Y}}\,(\mathrm{m^2\,s^{-1}})$，モル質量 $W_{\mathrm{g}}\,(\mathrm{kg\,kmol^{-1}})$，拡散体積 v である．気相中の化学種が二種類の場合は，$D_{\mathrm{g}} = D_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X,\,Y}}$ とした．気相中の化学種が三種類以上の場合は，各化学種のモル質量と拡散体積を平均した値を用いて，$D_{\mathrm{g}} = D_{\mathrm{g}}^{\bar{\mathrm{X}},\,\bar{\mathrm{X}}}$ のようにモデル化した．ここで，$\bar{\mathrm{X}}$ は平均化した化学種を表す．液相の粘性係数は一定とし，$\mu_{\mathrm{l}} = \mu_{\mathrm{l,\,0}} = 5.0 \times 10^{-3}\,\mathrm{Pa\,s}$ とした．水の場合，$\mu_{\mathrm{l,\,0}} = 8.5 \times 10^{-4}\,\mathrm{Pa\,s}$，溶鉄の場合，$\mu_{\mathrm{l,\,0}} = 5.0 \times 10^{-3}\,\mathrm{Pa\,s}$ [53] とした．気相の粘性係数は Sutherland's law で次式のように計算した．

$$\mu_{\mathrm{g}} = \frac{A_{\mathrm{s}}\sqrt{T}}{1 + T_{\mathrm{s}}/T} \tag{2.38}$$

$$A_{\mathrm{s}} = \sum_{\mathrm{X}} Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} A_{\mathrm{s}}^{\mathrm{X}} \tag{2.39}$$

$$T_{\mathrm{s}} = \sum_{\mathrm{X}} Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} T_{\mathrm{s}}^{\mathrm{X}} \tag{2.40}$$

ここで，$A_{\mathrm{s}}^{\mathrm{X}}\,(\mathrm{Pa\,s\,K^{-1/2}})$，$T_{\mathrm{s}}^{\mathrm{X}}\,(\mathrm{K})$ は化学種に依存する定数であり，GRI-Mech 3.0 データベース [74] の値を用いた．液相の熱伝導率は一定とし，$\lambda_{\mathrm{l}} = \lambda_{\mathrm{l,\,0}}$ とした．水の場合，$\lambda_{\mathrm{l,\,0}} = 0.5\,\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$，溶鉄の場合，$\lambda_{\mathrm{l,\,0}} = 40\,\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$ [58, 59, 75] とした．気相の熱伝導率は次式のように modified Eucken model [76] で計算した．

$$\lambda_{\mathrm{g}} = \mu_{\mathrm{g}}(C_{\mathrm{p,\,g}} - R_{\mathrm{g}})\left(1.32 + \frac{1.77 R_{\mathrm{g}}}{C_{\mathrm{p,\,g}} - R_{\mathrm{g}}}\right) \tag{2.41}$$

液相の定圧比熱は一定とし，$C_{\mathrm{p,\,l}} = C_{\mathrm{p,\,l,\,0}}$ とした．水の場合，$C_{\mathrm{p,\,l,\,0}} = 4181\,\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$，溶鉄の場合，$C_{\mathrm{p,\,l,\,0}} = 824\,\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$ [77] とした．気相の定圧比熱は次式で表される NASA polynomials [78] で計算した．

$$C_{\mathrm{p,\,g}} = R_{\mathrm{g}}(c_4 T^4 + c_3 T^3 + c_2 T^2 + c_1 T + c_0) \tag{2.42}$$

$$c_i = \sum_{\mathrm{X}} Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X}} c_i^{\mathrm{X}} \tag{2.43}$$

ここで，c_i^{X} は化学種に依存した定数であり，GRI-Mech 3.0 データベース [74] の値を用いた．

界面張力による体積力は continuum surface force モデル [79] を用いて以下のように計算される．

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{s}} = \sigma\kappa\nabla\alpha_{\mathrm{l}} \tag{2.44}$$

$$\kappa = -\nabla\cdot\left(\frac{\nabla\alpha_{\mathrm{l}}}{|\nabla\alpha_{\mathrm{l}}|}\right) \tag{2.45}$$

ここで，界面の曲率 $\kappa\,(\mathrm{m^{-1}})$，界面張力係数 $\sigma\,(\mathrm{N\,m^{-1}})$ である．液相が水の場合，水–気相間の界面張力係数として，$\sigma = 0.07\,\mathrm{N\,m^{-1}}$ を用いた．液相が溶鉄の場合は，溶鉄–気相間の界面張力係数として，$\sigma = 1.7\,\mathrm{N\,m^{-1}}$ [80] を用いた．

CO_2 による脱炭を扱った第 4 章の計算では，化学反応による質量変化速度 $\mathcal{R}$ として，界面での脱炭反応による質量変化速度 $\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}$，$\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}$ を考慮した．O_2，CO_2 による脱炭を扱った第 5 章の計算では，これらに加えて，気相中での二次燃焼による質量変化速度 $\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g}}$ を考慮した．脱炭反応に対するモデルは，第 2.2 節で述べる．二次燃焼に対するモデルとして，乱流燃焼モデルの一つである eddy dissipation concept (EDC) モデル [81] を用いた．EDC モデルでは，下記の式によって質量変化速度が計算される．

$$\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g}} = \begin{cases} \mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g,\,laminar,\,}\tau^*} & \text{for } \gamma_{\mathrm{L}} \geq 1.0 \\ \max(\min(\gamma^a_{\mathrm{L}}/(1-\gamma^b_{\mathrm{L}}), 1.0), 0.0)\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g,\,laminar,\,}\tau^*} & \text{for } \gamma_{\mathrm{L}} < 1.0 \end{cases} \tag{2.46}$$

$$\gamma_{\mathrm{L}} = C_\gamma \left(\frac{\nu\epsilon}{k^2}\right)^{1/4} \tag{2.47}$$

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \tag{2.48}$$

ここで，モデル定数 $a = 2.0$，$b = 2.0$，$C_\gamma = 2.1377$，$C_\tau = 0.4083$ であり，時間 τ^* における層流の場合の平均質量変化速度 $\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g,\,laminar,\,}\tau^*}$ である．平均質量変化速度は，以下の不可逆の一段階総括反応モデル [64] に基づく反応機構を仮定して，時間 τ^* における化学種の質量の時間変化を解き，時間 τ^* で平均化して求めた．

$$\mathrm{CO} + 0.5\mathrm{O_2} = \mathrm{CO_2} \tag{2.49}$$

$$r_{\mathrm{pc}} = 3.1 \times 10^8 \exp\left(-\frac{1.58 \times 10^5}{\mathrm{R}T}\right) \frac{\rho_{\mathrm{g}} Y^{\mathrm{CO}}_{\mathrm{g}}}{M^{\mathrm{CO}}_{\mathrm{g}}} \frac{\rho_{\mathrm{g}} Y^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g}}}{M^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g}}} \tag{2.50}$$

ここで，$r_{\mathrm{pc}}\,(\mathrm{kmol\,m^{-3}\ s^{-1}})$ は式 (2.49) の反応速度である．式 (2.49) で表される二次燃焼による生成熱 Q_{g} は以下の式で計算される [74]．

$$Q_{\mathrm{g}} = \frac{\mathcal{R}^{\mathrm{CO}}_{\mathrm{g}}}{M^{\mathrm{CO}}_{\mathrm{g}}} \left(-\Delta H^{\mathrm{o}}_{\mathrm{CO+0.5O_2=CO_2}}\right) \tag{2.51}$$

$$\Delta H^{\mathrm{o}}_{\mathrm{CO+0.5O_2=CO_2}} = -283089.91\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \tag{2.52}$$

2.1.2　非保存形の移流項の離散化法

保存方程式 (2.15)–(2.20) には下記の形の項が多数存在する．

$$\rho\frac{\mathrm{D}\phi}{\mathrm{D}t} = \rho\frac{\partial\phi}{\partial t} + \rho\boldsymbol{U}\cdot\nabla\phi \tag{2.53}$$

ここで，任意の物理量 ϕ である．Thermo CIP-CUP 法などの CIP-CUP 法に基づく圧力ベースの統一解法では，式中の物質微分項 $\mathrm{D}\phi/\mathrm{D}t$ は，セミラグランジュスキームを用いて離散化される [1, 36, 82]．本計算法では，これらの解法とは異なり，下記のように，物質微分項の移流項 $\rho\boldsymbol{U}\cdot\nabla\phi$ を保存部分 $\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U}\phi)$ と残りの部分 $-\phi\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U})$ に分割する．

$$\rho\frac{\mathrm{D}\phi}{\mathrm{D}t} = \rho\frac{\partial\phi}{\partial t} + \rho\boldsymbol{U}\cdot\nabla\phi = \rho\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U}\phi) - \phi\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{U}) \tag{2.54}$$

そして，セル中心有限体積法を用いて，これを下記のように離散化する．

$$\rho\frac{\mathrm{D}\phi}{\mathrm{D}t} = \rho^n\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t} + \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\phi_{\mathrm{f}}^{n+1}\rho_{\mathrm{f}}^n\,\Phi_{\mathrm{f}}^n - \frac{\phi^{n+1}}{V}\sum_{\mathrm{f}}\rho_{\mathrm{f}}^n\,\Phi_{\mathrm{f}}^n \tag{2.55}$$

ここで，時間刻み $\Delta t\,(\mathrm{s}^{-1})$，上付き添字 n は時刻ステップ，下付き添字 f はセル面 f での値，$\Phi_{\mathrm{f}}^n\,(\mathrm{m}^3\,\mathrm{s}^{-1})$ はセル面を通過する体積流量，記号 $\sum_{\mathrm{f}}$ はセル面にわたる総和を表す．式 (2.55) において，ϕ_{f}^{n+1} は，セル中心の値から，二次精度中心差分法，一次精度風上法，TVD スキームなどの通常の離散化スキームで補間される．体積流量 Φ_{f}^n は，次節で述べる圧力–速度–密度の分離解法により，質量保存式を満足するように計算され，セル面における密度 ρ_{f} はセル中心の値から二次精度中心差分法によって補間される．非圧縮性流体の極限において，$\sum_{\mathrm{f}}\rho_{\mathrm{f}}^n\,\Phi_{\mathrm{f}}^n$ は質量保存式よりゼロとなるので，この離散化式は保存形の基礎式に基づく離散化式に帰着する．セミラグランジュスキームを用いた場合に対して，この離散化法は，離散化スキームの選択の自由度が高い，任意多面体格子からなる非構造格子での実装が容易という 2 つの利点を持ち合わせている．

2.1.3　圧力–速度–密度連成の分離解法

OpenFOAM [83] で用いられている多段解法を用いて，圧力–速度–密度連成を分離して解く．

圧力–速度–密度連成を解く前に，まず，isoAdvector 法 [84] を用いて，下記のように離散化したカラー関数の輸送方程式を解く．

$$\begin{aligned}\frac{\alpha_{\mathrm{l}}^{n+1}-\alpha_{\mathrm{l}}^n}{\Delta t} + \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\Phi_{\alpha_{\mathrm{l}},\mathrm{f}}^n - \frac{\alpha_{\mathrm{l}}^n}{V}\sum_{\mathrm{f}}\Phi_{\mathrm{f}}^n = \\ \alpha_{\mathrm{l}}^n\frac{\alpha_{\mathrm{g}}^n}{\rho_{\mathrm{g}}^n}\left(\frac{\rho_{\mathrm{g}}^n-\rho_{\mathrm{g}}^{n-1}}{\Delta t} + \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\rho_{\mathrm{g},\mathrm{f}}^n\,\Phi_{\mathrm{f}}^n - \frac{\rho_{\mathrm{g},\mathrm{f}}^n}{V}\sum_{\mathrm{f}}\Phi_{\mathrm{f}}^n\right) + \alpha_{\mathrm{g}}^n\frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l,l\text{–}g}}^n}{\rho_{\mathrm{l},0}} - \alpha_{\mathrm{l}}^n\frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g,l\text{–}g}}^n}{\rho_{\mathrm{g}}^n}\end{aligned} \tag{2.56}$$

ここで，isoAdvector 法で計算されるセル界面における液相の体積流量 $\Phi_{\alpha_{\mathrm{l}},\mathrm{f}}^n$ である．そして，化学種の質量保存式 (2.16)，(2.17)，エネルギー保存式 (2.20) を解き，化学種の質量分率 $Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X},n+1}$，$Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},n+1}$ と温度 T^{n+1} を求める．化学種の質量保存式 (2.16)，(2.17)，エネルギー保存式 (2.20) を解く際，前節で述べた移流項の離散化法を適用し，体積流量 Φ_{f}^n およびカラー関数を解く際に計算したセル面における液相，気相の体積流量 $\Phi_{\alpha_{\mathrm{l}},\mathrm{f}}^n$，$\Phi_{\alpha_{\mathrm{g}},\mathrm{f}}^n = \Phi_{\mathrm{f}}^n - \Phi_{\alpha_{\mathrm{l}},\mathrm{f}}^n$ を用

いて以下のように離散化する．

$$\rho_{\mathrm{l},\,0}\alpha_{\mathrm{l}}^{n}\frac{Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X},\,n+1}-Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X},\,n}}{\Delta t}+\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}Y_{\mathrm{l,\,f}}^{\mathrm{X},\,n+1}\rho_{\mathrm{l},\,0}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{l},\,\mathrm{f}}}^{n}-\frac{Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X},\,n+1}}{V}\sum_{\mathrm{f}}\rho_{\mathrm{l},\,0}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{l},\,\mathrm{f}}}^{n}$$
$$=\nabla\cdot\left(\rho_{\mathrm{l},\,0}\alpha_{\mathrm{l}}^{n+1}D_{\mathrm{l}}^{n+1}\nabla Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X},\,n+1}\right)+\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X},\,n+1}-Y_{\mathrm{l,\,f}}^{\mathrm{X},\,n+1}\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{n+1}\quad(2.57)$$

$$\rho_{\mathrm{g}}^{n}\alpha_{\mathrm{g}}^{n}\frac{Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n+1}-Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n}}{\Delta t}+\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}Y_{\mathrm{l,\,f}}^{\mathrm{X},\,n+1}\rho_{\mathrm{g,\,f}}^{n}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}}^{n}-\frac{Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n+1}}{V}\sum_{\mathrm{f}}\rho_{\mathrm{g,\,f}}^{n}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}}^{n}$$
$$=\nabla\cdot\left(\rho_{\mathrm{g}}^{n}\alpha_{\mathrm{g}}^{n+1}D_{\mathrm{g}}^{n+1}\nabla Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n+1}\right)+\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X},\,n+1}+\mathcal{R}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n+1}-Y_{\mathrm{g,\,f}}^{\mathrm{X},\,n+1}\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{n+1}\quad(2.58)$$

$$C_{\mathrm{p}}^{n}\rho^{n}\frac{T^{n+1}-T^{n}}{\Delta t}$$
$$+C_{\mathrm{p}}^{n}\left[\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}T_{\mathrm{f}}^{n+1}(\rho_{\mathrm{l},\,0}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{l},\,\mathrm{f}}}^{n}+\rho_{\mathrm{g,\,f}}^{n}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}}^{n})-\frac{T^{n+1}}{V}\sum_{\mathrm{f}}(\rho_{\mathrm{l},\,0}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{l},\,\mathrm{f}}}^{n}+\rho_{\mathrm{g,\,f}}^{n}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}}^{n})\right]$$
$$=\beta^{n+1}T^{n+1}\left(\frac{p^{n}-p^{n-1}}{\Delta t}+\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}p_{\mathrm{f}}^{n}\,\Phi_{\mathrm{f}}^{n}-\frac{p^{n}}{V}\sum_{\mathrm{f}}\Phi_{\mathrm{f}}^{n}\right)+\nabla\cdot\left(\lambda^{n+1}\nabla T^{n+1}\right)$$
$$+Q_{\mathrm{l\text{–}g}}^{n+1}+Q_{\mathrm{g}}^{n+1}$$
$$-\left[\rho^{n}\left(\frac{K^{n}-K^{n-1}}{\Delta t}+\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}K_{\mathrm{f}}^{n}\,\Phi_{\mathrm{f}}^{n}-\frac{K^{n}}{V}\sum_{\mathrm{f}}\Phi_{\mathrm{f}}^{n}\right)\right.$$
$$\left.-\rho^{n}\boldsymbol{U}^{n}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{U}^{n}-\boldsymbol{U}^{n-1}}{\Delta t}+\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^{n}\,\Phi_{\mathrm{f}}^{n}-\frac{\boldsymbol{U}^{n}}{V}\sum_{\mathrm{f}}\Phi_{\mathrm{f}}^{n}\right)\right]\quad(2.59)$$

ここで，単位質量あたりの運動エネルギー $K=\boldsymbol{U}\cdot\boldsymbol{U}/2\,(\mathrm{m^2\,s^{-2}})$ であり，エネルギー保存式の右辺の最後の 2 つの項は全エネルギー保存を満足するように付け加えた補正項である．エネルギー保存式は，全エネルギー保存式から運動エネルギー保存式を引くことにより導出される．導出過程において，$\rho\mathrm{D}K/\mathrm{D}t=\boldsymbol{U}\cdot\rho\mathrm{D}\boldsymbol{U}/\mathrm{D}t$ の関係式が用いられる．しかしながら，離散化式においては，この関係式は成立しない．したがって，補正項として，関係式の誤差を考慮した．また，本研究では，極超音速よりも遅い超音速流しか扱わないため，粘性散逸項は無視した．式中の拡散項は，この後に出てくるものも含めて全て付録 A に示したように離散化される．

次に，求めた $Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X},\,n+1}$，$Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n+1}$，$T^{n+1}$ を使って状態方程式 (2.36) から気相の中間密度 $\rho_{\mathrm{g}}^{*}=p^{n}/(R_{\mathrm{g}}^{n+1}T^{n+1})$，気相密度の圧力微分 $\psi_{\mathrm{g}}^{n+1}=\partial\rho_{\mathrm{g}}/\partial p=1/(R_{\mathrm{g}}^{n+1}T^{n+1})$ を計算する．ρ_{g}^{*}，ψ_{g}^{n+1} は，以下で示すように圧力–速度–密度連成の分離に用いられる．

圧力–速度–密度連成の分離解法は多段階法の 1 つである部分段階法に基づいている．運動

量保存式を以下のように 2 段階に分けて時間進展させる．

$$\rho^n \frac{\boldsymbol{U}^* - \boldsymbol{U}^n}{\Delta t} + \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}} \boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^n (\rho_{\mathrm{l},\,0}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{l},\,\mathrm{f}}}^n + \rho_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}^n\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}}^n) - \frac{\boldsymbol{U}^n}{V}\sum_{\mathrm{f}} (\rho_{\mathrm{l},\,0}\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{l},\,\mathrm{f}}}^n + \rho_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}^n\,\Phi_{\alpha_{\mathrm{g},\,\mathrm{f}}}^n)$$
$$- \nabla\cdot\left[\mu^{n+1}\left(\nabla\boldsymbol{U}^n + (\nabla\boldsymbol{U}^n)^{\mathrm{T}} - \frac{2}{3}\boldsymbol{I}\nabla\cdot\boldsymbol{U}^n\right)\right] = 0 \quad (2.60)$$

$$\rho^n \frac{\boldsymbol{U}^{n+1} - \boldsymbol{U}^*}{\Delta t} = \langle -\nabla p^{n+1} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{v}}^{n+1}\rangle_{\mathrm{f}\to\mathrm{c}} \quad (2.61)$$

ここで，$\boldsymbol{F}_{\mathrm{v}}\,(\mathrm{kg\,m^{-1}\,s^{-2}})$ は界面張力による体積力と重力の寄与であり，以下の式で表される．

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{v}}^{n+1} = \sigma\kappa^{n+1}\nabla\alpha^{n+1} + \rho^n\nabla G \quad (2.62)$$

式 (2.61) において，$\langle\rangle_{\mathrm{f}\to\mathrm{c}}$ はセル面中心点からセル中心点への補間を表し，以下の式で計算される [85].

$$\langle\boldsymbol{A}\rangle_{\mathrm{f}\to\mathrm{c}} = \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}} (\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{A}_{\mathrm{f}})(\boldsymbol{x}_{\mathrm{f}} - \boldsymbol{x}_{\mathrm{c}}) \quad (2.63)$$

ここで，任意のベクトル $\boldsymbol{A}$，セル面の面ベクトル $\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}$，セル中心の位置ベクトル $\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}}$ である．質量保存式 (2.18) は以下のように離散化される．

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}} \boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^{n+1} = -\frac{\alpha_{\mathrm{g}}^{n+1}}{\rho_{\mathrm{g}}^*}\frac{\mathrm{D}\rho_{\mathrm{g}}^{n+1}}{\mathrm{D}t} + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l},\,\mathrm{l\text{–}g}}^{n+1}}{\rho_{\mathrm{l},\,0}} + \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g},\,\mathrm{l\text{–}g}}^{n+1}}{\rho_{\mathrm{g}}^*} \quad (2.64)$$

式中の気相密度 ρ_{g}^{n+1} は圧力を用いて以下の式で表し，

$$\rho_{\mathrm{g}}^{n+1} = \rho_{\mathrm{g}}^* + \psi_{\mathrm{g}}^{n+1}(p^{n+1} - p^n) \quad (2.65)$$

気相密度の物質微分を以下の式で近似する．

$$\frac{\mathrm{D}\rho_{\mathrm{g}}^{n+1}}{\mathrm{D}t} = \frac{\mathrm{D}\rho_{\mathrm{g}}^*}{\mathrm{D}t} + \psi_{\mathrm{g}}^{n+1}\frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t} \quad (2.66)$$

ここで，後述の圧力方程式を数値的に解く際の係数行列を対称行列にすることによって計算コストを軽減するために，圧力に関する移流項 $\nabla\cdot\psi_{\mathrm{g}}^{n+1}(p^{n+1} - p^n) - \psi^{n+1}(p^{n+1} - p^n)\nabla\cdot\boldsymbol{U}^n$ は無視した．式 (2.61) を用いると，式 (2.64) の左辺の $\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^{n+1}$ は下記のように記述できる．

$$\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^{n+1} = \boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^* - \left(\frac{\Delta t}{\rho^n}\right)_{\mathrm{f}}\left(\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\nabla p_{\mathrm{f}}^{n+1} - \boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{F}_{\mathrm{v,\,f}}^{n+1}\right) \quad (2.67)$$

式 (2.64)，(2.66)，(2.67) を合わせると以下の圧力方程式が得られる．

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\left(\frac{\Delta t}{\rho^n}\right)_{\mathrm{f}}(\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\nabla p_{\mathrm{f}}^{n+1}) = \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^* + \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\left(\frac{\Delta t}{\rho^n}\right)_{\mathrm{f}}\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}\cdot\boldsymbol{F}_{\mathrm{v,\,f}}^{n+1}$$
$$+ \frac{\alpha_{\mathrm{g}}^{n+1}}{\rho_{\mathrm{g}}^*}\left(\frac{\rho_{\mathrm{g}}^* - \rho_{\mathrm{g}}^n}{\Delta t} + \frac{1}{V}\sum_{\mathrm{f}}\rho_{\mathrm{g,\,f}}^*\,\Phi_{\mathrm{f}}^n - \frac{\rho_{\mathrm{g}}^*}{V}\sum_{\mathrm{f}}\Phi_{\mathrm{f}}^n + \psi_{\mathrm{g}}^{n+1}\frac{p^{n+1} - p^n}{\Delta t}\right)$$
$$- \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{l},\,\mathrm{l\text{–}g}}^{n+1}}{\rho_{\mathrm{l},\,0}} - \frac{\mathcal{R}_{\mathrm{g},\,\mathrm{l\text{–}g}}^{n+1}}{\rho_{\mathrm{g}}^*} \quad (2.68)$$

式 (2.68) の左辺第 1 項の $(\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}} \cdot \nabla p_{\mathrm{f}}^{n+1})$ は式 (A.2) のように離散化される．圧力方程式 (2.68) を解くと，圧力 p^{n+1} が得られる．速度 $\boldsymbol{U}^{n+1}$ は式 (2.61)，体積流量 $\Phi_{\mathrm{f}}^{n+1} = \boldsymbol{S}_{\mathrm{f}} \cdot \boldsymbol{U}_{\mathrm{f}}^{n+1}$ は式 (2.67)，密度 ρ_{g}^{n+1} は式 (2.65) から求められる．密度 ρ^{n+1} は，式 (2.34) を用いて，以下のように計算される．

$$\rho^{n+1} = \alpha_{\mathrm{l}}^{n+1} \rho_{\mathrm{l},\,0} + \alpha_{\mathrm{g}}^{n+1} \rho_{\mathrm{g}}^{n+1} \tag{2.69}$$

2.2　脱炭反応モデル

野村と森のモデル [3] を参考にして O_2，CO_2 による溶鉄の脱炭反応モデルを構築し，CFD ソルバと統合した．野村と森は，炭素濃度が約 1.0 mass%，温度 1873 K の溶鉄の CO_2 による脱炭をモデル化しており，O_2 による脱炭は扱っていない．本研究では，CO_2 による脱炭に関しては，野村と森のモデルに従ってモデル化し，O_2 による脱炭に関しては，Simento らの O_2 による脱炭実験の結果に基づいてモデル化した．野村と森のモデルは，壁面ジェットの実験式および実験で得られた脱炭速度データを用いることを前提に構築されているが，本研究では，CFD ソルバで計算される物理量を可能な限り利用するようにモデルを構築した．

O_2，CO_2 による溶鉄の脱炭の素過程は，気液界面における化学反応と気液界面の境界層における物質伝達である．高炭素濃度の溶鉄では，気液界面の反応速度を律速する反応は，下記の O_2 と C および CO_2 と C の直接反応だと考えられる．

$$\mathrm{O_2^{\dagger}} + 2\mathrm{C^{\dagger}} = 2\mathrm{CO^{\dagger}} \tag{2.70}$$

$$\mathrm{CO_2^{\dagger}} + \mathrm{C^{\dagger}} = 2\mathrm{CO^{\dagger}} \tag{2.71}$$

ここで，上付き添字 † は界面の値であることを表す．高炭素濃度の溶鉄における O の溶解性は低いため，溶解反応 $\mathrm{O_2^{\dagger}} = 2\mathrm{O^{\dagger}}$，$\mathrm{CO_2^{\dagger}} = \mathrm{C^{\dagger}} + 2\mathrm{O^{\dagger}}$，$\mathrm{CO^{\dagger}} = \mathrm{C^{\dagger}} + \mathrm{O^{\dagger}}$ は気液界面の反応速度を律速しないとした．Simento らの O_2 による炭素濃度 1.0–4.0 mass%，温度 1723 K の溶鉄の脱炭実験の結果 [86] に基づき，式 (2.70) で表される O_2 による脱炭反応の反応速度は非常に大きく，気液界面では，$\mathrm{O_2^{\dagger}}$ がゼロとなるまで反応が進むとモデル化した．一方，式 (2.71) で表される CO_2 による脱炭反応については，文献 [3, 61] に従い，CO_2 の解離吸着反応が律速過程となるとし，有限の解離吸着反応速度を考慮してモデル化した．

式 (2.71) の反応は，気相中の濃度境界層を移動し界面に到達した $\mathrm{CO_2^{\dagger}}$ が界面の吸着サイトに吸着し，$\mathrm{CO^{\dagger}}$ と $\mathrm{O^{*}}$ に解離した後，液相側の界面に存在する $\mathrm{C^{\dagger}}$ と反応して，$\mathrm{CO^{\dagger}}$ となる素反応からなると考えられている．これを式で表すと以下のようになる．

$$\mathrm{CO_2^{\dagger}} = \mathrm{CO^{\dagger}} + \mathrm{O^{*}} \tag{2.72}$$

$$\mathrm{O^{*}} + \mathrm{C^{\dagger}} = \mathrm{CO^{\dagger}} \tag{2.73}$$

ここで，気液界面に吸着した O を $\mathrm{O^{*}}$ で表した．これらの 2 つの素反応の内，式 (2.72) で表される CO_2 の解離吸着反応が律速過程と考えられており，CO_2 の反応速度は以下の式でモデ

ル化される [3, 61].

$$r^{\mathrm{CO_2}} = s\bar{p}^{\mathrm{CO_2},\dagger} \tag{2.74}$$

ここで，$r^{\mathrm{CO_2}}\,(\mathrm{mol\,m^{-2}\,s^{-1}})$ は単位面積あたりの $\mathrm{CO_2}$ の消費速度であり，$\bar{p}^{\mathrm{X}}\,(\mathrm{atm})$ は標準気圧単位での化学種 X の分圧，$s\,(\mathrm{mol\,m^{-2}\,s^{-1}\,atm^{-1}})$ は式 (2.72) の順反応の反応速度定数である．高 C 濃度の溶鉄において，式 (2.72) の逆反応の反応速度は，順反応の反応速度よりも十分小さいため，無視した [3]．反応速度の温度依存性を考慮し，反応速度定数には，以下の式 [61, 87] を用いた．

$$\log s = 3.007 - 1.049 \times 10^4 T^{-1} \tag{2.75}$$

実転炉の操業実績によれば，溶鉄中の炭素濃度が 4.0–0.3 mass%，溶鉄温度が，1250–1600 °C の範囲で変化しても，吹き込まれた酸素のほぼ全量が脱炭で消費されるため，この間に，脱炭現象に大きな変化は生じないと考えられる [9]．したがって，ここで述べた気液界面における化学反応の律速過程および反応速度に関する仮定も，炭素濃度 0.3 mass% 以上，温度 1250–1600 °C の溶鉄に対して成立すると考えられる．

物質伝達による化学種のモル流束 $N\,(\mathrm{mol\,m^{-2}\,s^{-1}})$ は以下のように，拡散によるモル流束と移流によるモル流束の和で表される．

$$N^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}} = \frac{k_{\mathrm{g}}}{\mathrm{R_a}T}\bar{p}^{\mathrm{O_2}} \tag{2.76}$$

$$N^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}} = -\frac{k_{\mathrm{g}}}{\mathrm{R_a}T}(\bar{p}^{\mathrm{CO_2},\dagger} - \bar{p}^{\mathrm{CO_2}}) + \frac{\bar{p}^{\mathrm{CO_2},\dagger}}{\bar{p}^{\dagger}}\left(N^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}} + N^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}} + N^{\mathrm{CO}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}\right) \tag{2.77}$$

$$N^{\mathrm{CO}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}} = -\frac{k_{\mathrm{g}}}{\mathrm{R_a}T}(\bar{p}^{\mathrm{CO},\dagger} - \bar{p}^{\mathrm{CO}}) + \frac{\bar{p}^{\mathrm{CO},\dagger}}{\bar{p}^{\dagger}}\left(N^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}} + N^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}} + N^{\mathrm{CO}}_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}\right) \tag{2.78}$$

ここで，気液界面で $\mathrm{O_2}$ は全て消費されると仮定したため，$\bar{p}^{\mathrm{O_2},\dagger} = 0\,\mathrm{atm}$ とした．気体定数 $\mathrm{R_a} = 8.20574 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,atm\,K^{-1}\,mol^{-1}}$，物質伝達係数 $k\,(\mathrm{m\,s^{-1}})$，圧力 $\bar{p}^{\dagger} = \sum_{\mathrm{X}} \bar{p}^{\mathrm{X},\dagger}$ である．モル流束の下付き添字 $\mathrm{g} \to \mathrm{int}$ は気相のバルクから流体速度で移動する界面へ向かう流束であることを表す．バルクの値 $\bar{p}^{\mathrm{X}}$ は $\bar{p}^{\mathrm{X}} = \rho_{\mathrm{g}} Y^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g}}(\mathrm{R_a}/M^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g}})T$ のように計算される．密度 ρ_{g}，温度 T には CFD のアルゴリズムで計算される n ステップ目の値を用いた．化学種の質量分率 Y^{X} については，式 (2.76) においては，$n+1$ ステップ目の値を用いて陰的に扱い，式 (2.77)，(2.78) においては，n ステップ目の値を用いて陽的に扱った． 流れが層流の場合，物質伝達係数 k_{g} は，拡散係数 D_{g} と距離 $\Delta_{\mathrm{g}}\,(\mathrm{m})$ を用いて以下のように計算される．

$$k_{\mathrm{g}} = \frac{D_{\mathrm{g}}}{\Delta_{\mathrm{g}}} \tag{2.79}$$

距離 Δ_{g} は図 2.1 に示すように，界面を含むセルにおける気相の重心と界面との距離で計算される．流れが乱流の場合，物質伝達係数 k_{g} は，Lamont and Scott による eddy cell モデル

[88]（付録 B 参照）で以下のように計算される．

$$k_{\mathrm{g}} = C_{\mathrm{s}} \left(\frac{D_{\mathrm{g}}}{\tau_{\mathrm{r}}} \right)^{1/2} \tag{2.80}$$

$$\tau_{\mathrm{r}} = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2} \tag{2.81}$$

ここで，動粘性係数 $\nu\,(\mathrm{m^2\,s^{-1}})$，エネルギー散逸率 $\epsilon\,(\mathrm{m^2\,s^{-3}})$ である．エネルギー散逸率は Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) モデルに基づいて計算される．

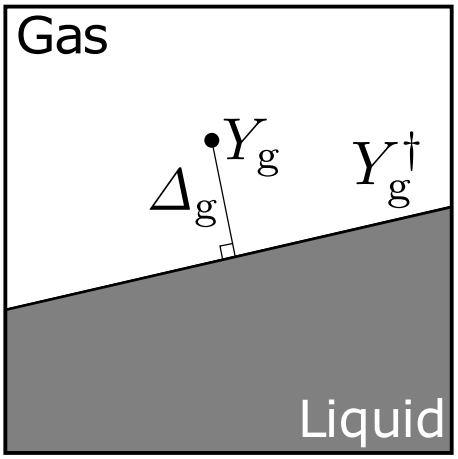


図 2.1: Distance between interface and center of mass of gas phase in a cell

気液界面の O^* は即座に反応して消費されるため，気液界面には化学種は蓄積されない．したがって，単位面積あたりの $\mathrm{CO_2}$ の消費速度 $r^{\mathrm{CO_2}}$ はモル流束と等しく，以下の式が成立する．

$$r^{\mathrm{CO_2}} = N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{CO_2}} \tag{2.82}$$

量論式 (2.70)，(2.71) からモル流束の間には以下の関係がある．

$$N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{CO}} = -2N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{O_2}} - 2N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{CO_2}} \tag{2.83}$$

$$N_{\mathrm{l}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{C}} = 2N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{O_2}} + N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{CO_2}} \tag{2.84}$$

変数 $\bar{p}^{\mathrm{CO_2},\dagger}$, $\bar{p}^{\mathrm{CO},\dagger}$ は, 関係式 (2.74)–(2.76) および (2.82), (2.83) を用いて, 式 (2.77), (2.78) を解くことにより得られる．この非線形連立方程式は Levenberg-Marquardt 法を使って数値的に解いた．

化学種の生成速度 $\mathcal{R}$ は，モル流束を用いて，以下のように表される．

$$\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{O_2}} = -N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{O_2}} M^{\mathrm{O_2}} \frac{A}{V} \tag{2.85}$$

$$\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{CO_2}} = -N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{CO_2}} M^{\mathrm{CO_2}} \frac{A}{V} \tag{2.86}$$

$$\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{CO}} = -N_{\mathrm{g}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{CO}} M^{\mathrm{CO}} \frac{A}{V} \tag{2.87}$$

$$\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{C}} = -N_{\mathrm{l}\to\mathrm{int}}^{\mathrm{C}} M^{\mathrm{C}} \frac{A}{V} \tag{2.88}$$

ここで，セル中の界面面積 $A\,(\mathrm{m}^2)$ である．界面面積は，isoAdvector 法 [84] において，カラー関数から界面を再構成する手法を用いて計算する．化学反応による熱生成速度 $Q_{\mathrm{l\text{–}g}}$ は以下のように計算される．

$$Q_{\mathrm{l\text{–}g}} = \frac{\mathcal{R}^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}}{M^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g}}}(-\Delta H^o_{2\mathrm{CO=O_2+2C}}) + \frac{\mathcal{R}^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}}{M^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g}}}(-\Delta H^o_{2\mathrm{CO=CO_2+C}}) \tag{2.89}$$

ここで，エンタルピー変化 $\Delta H^o\,(\mathrm{J\,mol^{-1}})$ は以下である [89].

$$\Delta H^o_{2\mathrm{CO=O_2+2C}} = 278633.6\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \tag{2.90}$$

$$\Delta H^o_{2\mathrm{CO=CO_2+C}} = -144700.6\,\mathrm{J\,mol^{-1}} \tag{2.91}$$

第 4 章の脱炭反応モデルの検証では，上記で説明したモデルの他，式 (2.71) で表される $\mathrm{CO_2}$ による脱炭反応のモデルとして，$\mathrm{CO_2}$ の解離吸着反応速度を無限大としたモデルも用いて計算し，両モデルを比較した．このモデルでは，$\mathrm{O_2}$ に対する式 (2.76) のように，気液界面で $\mathrm{CO_2}$ は完全に消費されると仮定し，式 (2.77) に $\bar{p}^{\mathrm{CO_2},\,\dagger} = 0\,\mathrm{atm}$，$\bar{p}^{\mathrm{CO_2}} = \rho_{\mathrm{g}}\mathrm{R}TY^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g}}/p_0$ を代入した以下の式で $\mathrm{CO_2}$ のモル流束を計算した．

$$N^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g\to int}} = k_{\mathrm{g}}\rho_{\mathrm{g}}\frac{\mathrm{R}}{p_0\mathrm{R_a}}Y^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g}} \tag{2.92}$$

ここで，$p_0 = 101325\,\mathrm{Pa}$ である．$\mathrm{CO_2}$ に対する質量保存式を解く際，式 (2.92) における質量分率 $Y^{\mathrm{CO_2}}_{\mathrm{g}}$ は $n+1$ ステップ目の値として陰的に扱った．なお，Cho et al. による反応モデル [4] は，気液界面での熱力学的平衡を仮定しているため，$\mathrm{CO_2}$ の解離吸着反応速度を有限としたモデルと無限としたモデルの間の反応速度を与えると推測される．

2.3　アルゴリズムのまとめ

本章で説明した計算アルゴリズムをまとめると以下となる．

1. 式 (2.56) を isoAdvector 法 [84] で解いてカラー関数 $\alpha_{\mathrm{l}}^{n+1}$ を求める．
2. EDC モデルに基づき，式 (2.46)–(2.52) を用いて，二次燃焼に関する化学反応速度 $\mathcal{R}_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n+1}$，熱生成速度 Q_{g}^{n+1} を求める．
3. 物質伝達係数を k_{g}^{n+1} へ更新した後，脱炭反応モデルを用いて，式 (2.85)–(2.89) の脱炭反応に関する化学反応速度 $\mathcal{R}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X},\,n+1}$，$\mathcal{R}_{\mathrm{g,\,l\text{–}g}}^{\mathrm{X},\,n+1}$，熱生成速度 $Q_{\mathrm{l\text{–}g}}^{n+1}$ を求める．
4. 拡散係数を D_{g}^{n+1} へ更新した後, 式 (2.57), (2.58) を解いて, 化学種の質量分率 $Y_{\mathrm{l}}^{\mathrm{X},\,n+1}$, $Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{X},\,n+1}$ を求める．
5. 定圧比熱，熱膨張係数，熱伝導率を C_{p}^{n+1}，β^{n+1}，λ^{n+1} へ更新した後，式 (2.59) を解いて，温度 T を求める．
6. 状態方程式 (2.36) により，気相密度，気相密度の圧力微分を ρ_{g}^{*}，ψ_{g}^{n+1} へ更新する．
7. 粘性係数を μ^{n+1} へ更新した後，式 (2.60) を解いて中間速度 $\boldsymbol{U}^{*}$ を求める．
8. 式 (2.68) を解いて，圧力 p^{n+1} を求める．
9. 式 (2.61)，(2.67)，(2.65)，(2.69) から，速度 $\boldsymbol{U}^{n+1}$，体積流量 Φ_{f}^{n+1}，気相密度 ρ_{g}^{n+1}，密度 ρ^{n+1} を計算する．
10. 計算対象が乱流となる場合，渦粘性係数，渦拡散係数，渦熱伝導率を乱流モデルに基づいて μ_{t}^{n+1}，D_{t}^{n+1}，$\lambda_{\mathrm{t}}^{n+1}$ へ更新する．
11. 時間ステップ数を n から $n+1$ へ更新し，1 から 10 の手順により，次の時間ステップの値を計算する．

上記アルゴリズムにおいて，第 2.1 節で示したように時間的に離散化した．空間に対する離散化および乱流モデルは，問題によって適したものを用いた．第 3–5 章で具体的な問題と共に，空間に対する離散化，乱流モデルを示す．各方程式に対する連立線形方程式の解法は，化学種の質量保存式，エネルギー保存式については，不完全 LU 分解を前処理に用いる前処理付き双共役勾配法，圧力方程式については，不完全コレスキー分解を前処理に用いる前処理付き共役勾配法を用いた．

第 3 章

流体計算の妥当性評価

本章では，第 2 章で述べた計算法を用いて，圧縮性単相流，非圧縮性乱流，非圧縮性気液二相流の代表的な問題を解くことにより，流体計算の妥当性を評価する．そして，転炉に対する水モデル実験としてしばしば研究対象とされる水浴に衝突する高速ガスジェットを計算し，上野らの実験結果 [6] と比較することによって，圧縮性気液二相流に対する計算の妥当性を確認する．

本章では，化学反応を伴う物質伝達および気相中の化学反応は扱わないため，基礎方程式 (2.15)–(2.20) 中の $\mathcal{R}$，Q はゼロである．また，単一の化学種からなる流体のみ扱うため，液相，気相における化学種の質量保存式 (2.16)，(2.17) 中の Y は定数であり，実質的には解かれることはない．

3.1 計算の概要

計算対象は以下である．

1. 円弧状バンプを越える流れ
2. 後ろ向きステップ流れ
3. ダム崩壊
4. 水浴に衝突する高速ガスジェット

1. 円弧状バンプを越える流れ は圧縮性単相流，2. 後ろ向きステップ流れ は非圧縮性単相乱流，3. ダム崩壊 は非圧縮性気液二相流に対する代表的な検証問題である．4. 水浴に衝突する高速ガスジェット は圧縮性の影響を無視できない気相と非圧縮性とみなすことができる液相が共存する流れであり，1–3 の全ての流れの特徴を含んでいる．

本計算では，移流項の空間離散化による数値振動を抑制するために，方程式ごとに適した手法を選択した．エネルギー保存式の移流項は，adaptive bounded QUICKEST スキーム [90]，運動量保存式の移流項は，高波数成分を除去する修正を加えた二次精度中心差分法 [83, 91] を適用した．ただし，円弧状バンプを越える流れについては，圧縮・膨張による急激な速度変化による数値振動を抑制するために，van Leer スキーム [92] を適用した．圧力方程式の移流項

には，Osher スキーム [93] を適用した．気液二相流の計算の移流項は，界面の非物理的な変形を軽減するために，isoAdvector スキームで特定される気液界面を含むセルを構成する面において一次精度風上差分法を用いた．拡散項は，二次精度中心差分法で離散化した．

時間刻みは，設定した最大クーラン数 $Co\,(-)$ に基づき，以下のように計算される．

$$\Delta t = Co \frac{V}{\max\left(\sum_{\mathrm{f}} |\Phi_{\mathrm{f}}|/2\right)} \tag{3.1}$$

本計算では，最大クーラン数を 0.5 以下とすることで安定に解が得られることが確認された．円弧状バンプを越える流れ，後ろ向きステップ流れ，ダム崩壊の問題に対しては，初期状態からの大きな変化やその時間変化を計算するために最大クーラン数を 0.3 と設定した．水浴に衝突する高速ガスジェットの問題に対しては，計算時間の短縮のために，最大クーラン数を 0.4 と設定した．

3.2　結果と考察

3.2.1　円弧状バンプを越える流れ

本計算法を用いて，円弧状バンプを越える流れ [94, 95] を計算し，従来の圧縮性単相流用のソルバによって得られた既往研究の結果と比較することにより，解の妥当性を評価した．計算の概要を図 3.1 に示す．超音速および亜音速条件での計算を実施した．超音速条件ではマッハ数 $\mathrm{Ma} = 1.65$，亜音速条件ではマッハ数 $\mathrm{Ma} = 0.5$ で，左の境界から気体が流入し，円弧状のバンプを越えて，右の境界から流出する．円弧状バンプの高さは，超音速条件では弦長 $H = 1.0\,\mathrm{m}$ の 4%，亜音速条件では，10% である．計算領域を x 方向に一様に 192 分割，y 方向に一様に 64 分割した二次元格子（192×64）を用いた．また，格子依存性を調査するために，96×32，384×128 の格子に加え，超音速条件では 60,778 個，亜音速条件では 10,463 個の多角形からなる格子も用いた．境界条件は次のように与えた．流入境界では，マッハ数が 1.65，0.5 となるように，速度，圧力，温度，液相のカラー関数をそれぞれ，$\boldsymbol{U} = (561, 0)$，$(170, 0)\,\mathrm{m\,s^{-1}}$，$p = 101325\,\mathrm{Pa}$，$T = 288.15\,\mathrm{K}$，$\alpha_{\mathrm{l}} = 0$ とした．流出境界では，速度，温度，液相のカラー関数の勾配をゼロとし，圧力を $p = 101325\,\mathrm{Pa}$ とした．上下の壁境界は滑り壁とし，圧力，温度，液相のカラー関数の勾配はゼロとした．初期条件は領域全体で，$\boldsymbol{U} = (0, 0)\,\mathrm{m\,s^{-1}}$，$p = 101325\,\mathrm{Pa}$，$T = 288.15\,\mathrm{K}$，$\alpha_{\mathrm{l}} = 0$ とした．気相は単一の化学種で構成されているとし，$W_{\mathrm{g}} = 28.97 \times 10^{-3}\,\mathrm{kg\,mol^{-1}}$，$C_{\mathrm{p,\,g}} = 1007.0\,\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$，$\mu_{\mathrm{g}} = 0.0\,\mathrm{Pa\,s}$，$\lambda_{\mathrm{g}} = 0.0\,\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$ として，非粘性流体として扱った．

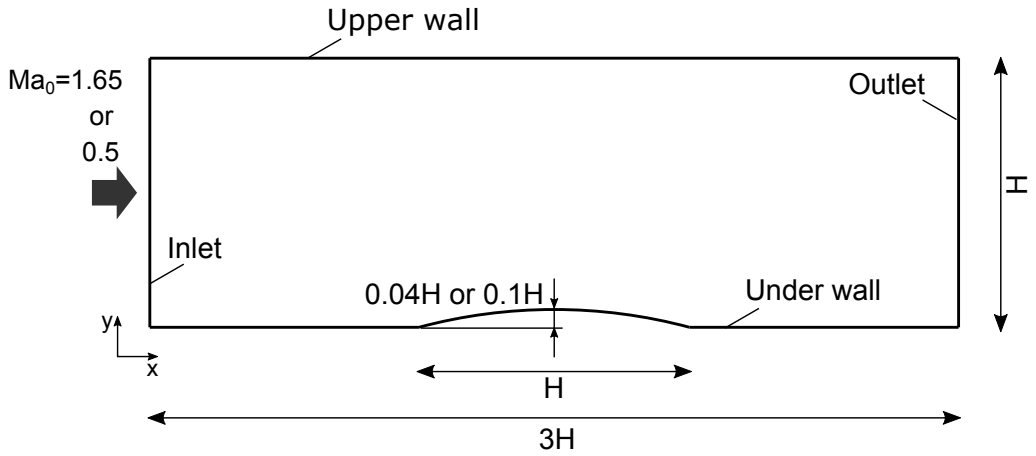
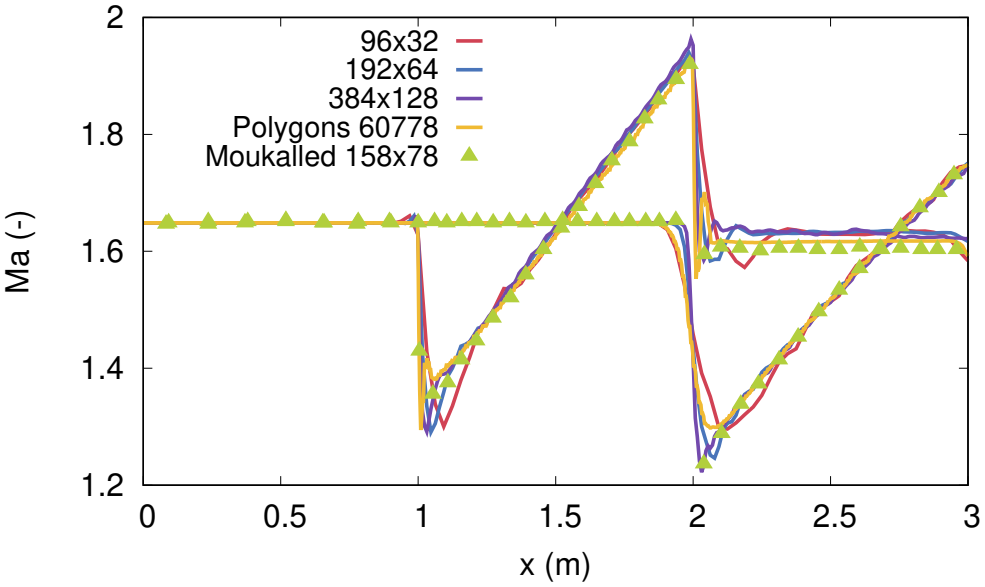


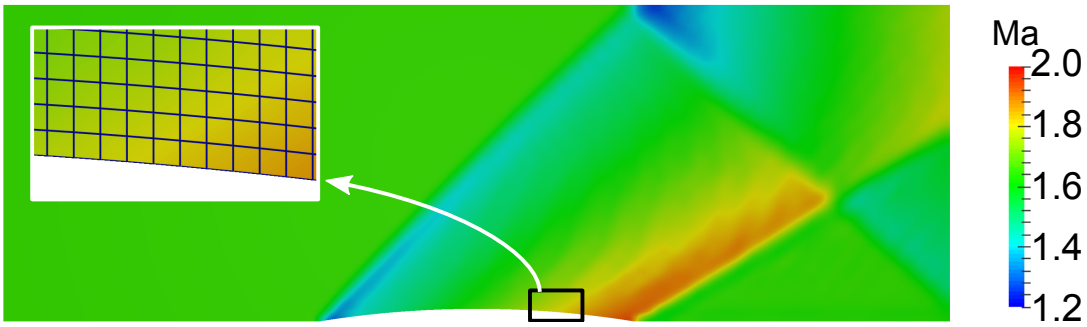
図 3.1: Schematic of flow field over a circular arc bump

本計算の質量保存性を確認するために，流入出流量を確認した．その結果，192×64 の格子における流入境界と流出境界における質量流量の差は，超音速条件の場合，0.02%，亜音速条件の場合，0.01% であった．他の格子の結果においても，質量流量の差は 0.01–0.1% と小さく，質量保存性は良好であった．

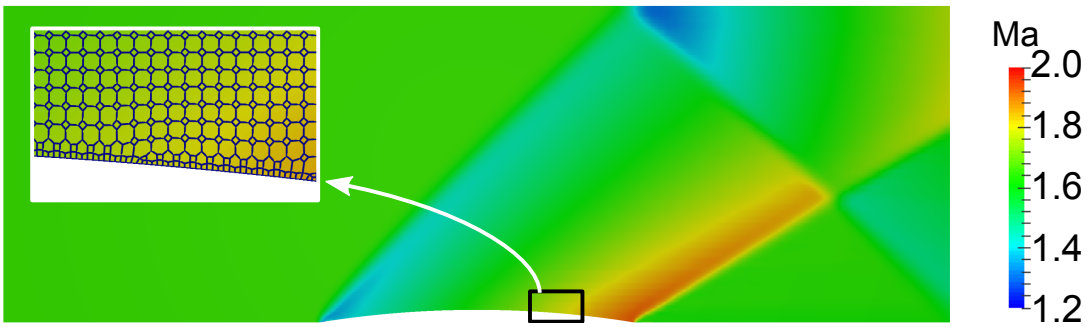
図 3.2, 3.3 にそれぞれ超音速，亜音速条件におけるマッハ数分布を示す．図 3.2a，3.3a に示すように，格子サイズを小さくすると，マッハ数分布はある一定の分布に近づいており，格子収束性が得られている．超音速条件の結果では，低解像度の格子および多角形格子を用いた場合に，$x = 1.0\,\mathrm{m}$ および $x = 2.0\,\mathrm{m}$ の衝撃波面の後ろで数値振動が発生しているが，その他の領域ではどの格子の結果も良く一致している．超音速の場合，下壁の $x = 1.0\,\mathrm{m}$ および $x = 2.0\,\mathrm{m}$，上壁の $x = 2.0\,\mathrm{m}$ において，衝撃波が発生している．亜音速条件の場合，下壁において，$x = 1.0\,\mathrm{m}$ および $x = 2.0\,\mathrm{m}$ でマッハ数が急激に変化する．これらマッハ数が急激に変化する場所においても，特に高解像度の格子を用いた場合に，本計算法の結果は，Moukalled らの結果 [94] と良く一致しており，流れの特徴が捉えられている．Moukalled らは保存形の質量保存式から導出される圧力方程式を解く従来の圧力ベースの解法を使っており，本計算法とは解法が異なるが，ほぼ同じ結果が得られる．また，図 3.2b，3.2c, 3.3b，3.3c に示すように，四角形格子，多角形格子の結果は，計算領域全体でも良く一致する．以上より，本計算法により，四角形格子，多角形格子のように用いる格子の種類を問わず，超音速から亜音速の圧縮性単相流に対して，従来の単相流用のソルバと同等の結果が得られると結論づけられる．



(a) Mach number profiles on the upper wall and the under wall, x is the distance from the left boundary

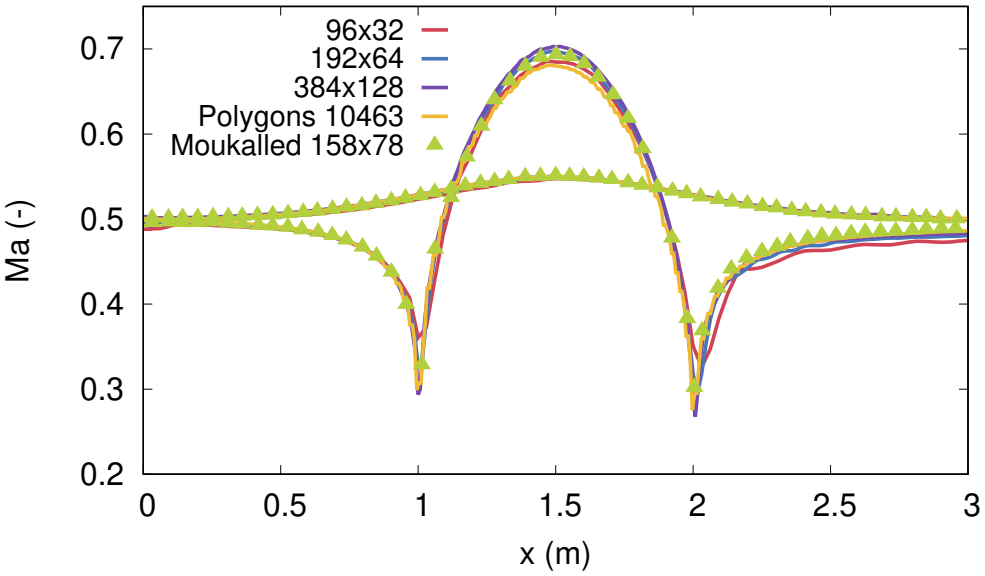


(b) Color contour of Mach number with the 192×64 mesh

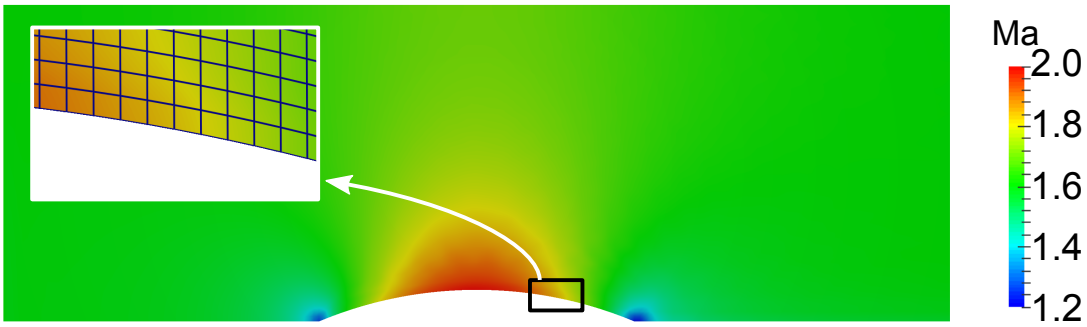


(c) Color contour of Mach number with the polygonal mesh

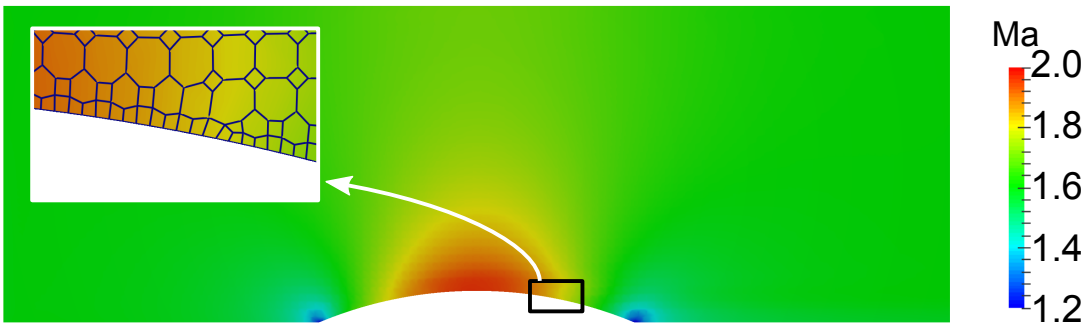
図 3.2: Mach number of flows over a circular arc bump, Ma = 1.65，超音速条件



(a) Mach number profiles on the upper wall and the under wall, x is the distance from the left boundary



(b) Color contour of Mach number with the 192×64 mesh



(c) Color contour of Mach number with the polygonal mesh

図 3.3: Mach number of flows over a circular arc bump, $\mathrm{Ma} = 0.5$，亜音速条件

3.2.2　後ろ向きステップ流れ

本計算法を用いて，後ろ向きステップ流れ [96, 97] を計算し，既往研究の実験結果と比較することにより，解の妥当性を評価した．計算の概要を図 3.4 に示す．流入速度は 1.0 m/s，ステップ高さ H は 1.0 m である．流入境界の高さは $2H$ であり，計算領域の奥行きは $3H$ とした．流入境界からステップの終端までの長さを $5H$ とし，ステップの終端から流出境界までの長さを $20H$ とした．流れを十分発達させるために，流入境界から $2.5H$ の位置に仮想の境界面を設け，仮想面の速度を流入境界にマッピングした．x 方向，y 方向，z 方向の格子サイズをそれぞれ $\Delta x = H/15$，$\Delta y = H/30$，$\Delta z = H/45$ とした格子 $(15 \times 30 \times 45)$ を用いた．また，解の格子依存性を調べるため，$5 \times 10 \times 15$，$10 \times 20 \times 30$ の解像度の格子および格子数 1,387,680 の多面体格子も用いた．境界条件は次のように与えた．流入境界では，温度を $T = 300\,\mathrm{K}$ とし，圧力勾配をゼロとした．速度については，前述のように，仮想の境界面の値をマッピングした．流出境界では，速度勾配をゼロとし，圧力を $p = 101325\,\mathrm{Pa}$ とした．流体が流出する場合は，温度勾配をゼロとし，流入する場合は，温度を $T = 300\,\mathrm{K}$ とした．前面および後面の境界は周期境界とした．壁境界は，速度をゼロとし，圧力勾配，温度勾配をゼロとした．ただし，運動量保存式を計算する際には壁関数 [98] で計算される応力を課した．初期条件は領域全体で，$\boldsymbol{U} = (0, 0, 0)\,\mathrm{m\,s^{-1}}$，$p = 101325\,\mathrm{Pa}$，$T = 300.0\,\mathrm{K}$，$\alpha_1 = 1$ とした．U_0 を流入境界における断面平均速度とした時に，$\mathrm{Re} = \rho_1 U_0 H/\mu_1 = 5500$ となるように，液相の物性値を与え，単一の化学種で構成されているとした．乱流モデルには，LES モデルの一つである Vreman モデル [99, 100] を用いた．Vreman モデルの詳細は付録 C に示す．

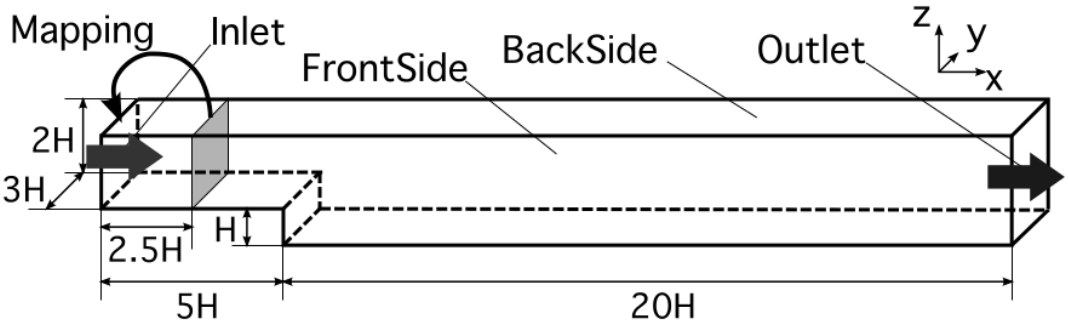
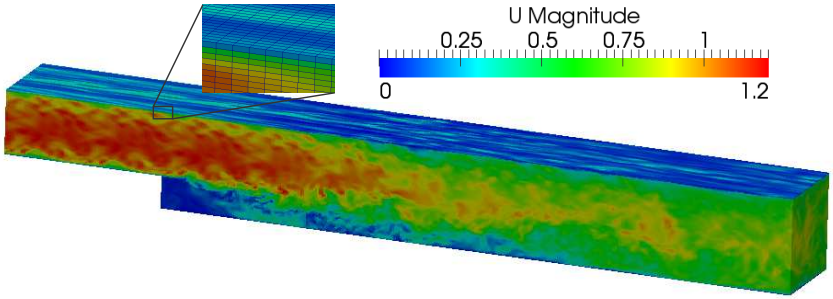


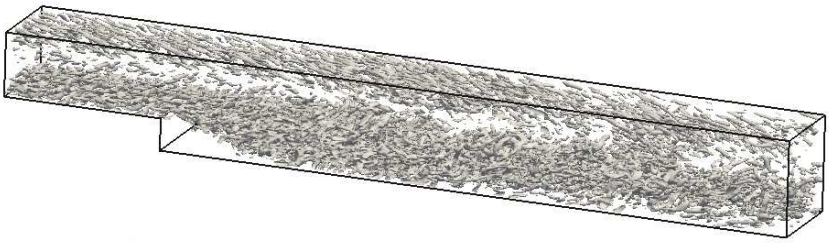
図 3.4: Schematic of flow field with backward-facing step, $H = 1.0\,\mathrm{m}$, $\mathrm{Re} = 5500$

図 3.5 に，速度の大きさのカラーコンターと速度勾配の第二不変量の等値面を示す．図 3.5a，3.5b が $15 \times 30 \times 45$ の六面体格子で計算した結果，図 3.5c，3.5d が多面体格子で計算した結果である．六面体格子，多面体格子のどちらを用いても，ストリークや小さな渦などの乱流構造を持つ流れが形成されている．図 3.6 に，主流方向速度の時間平均値と標準偏差の分布を示す．統計量は，流れが準定常状態に達した後の 300 s 間のデータから算出した．主流方向速度の時間平均値，標準偏差共に，笠木の実験結果 [101] と良く一致している．この系では，ステップによって下壁から離れた流れが下流で再び下壁に付着する距離（再付着距離）が計算

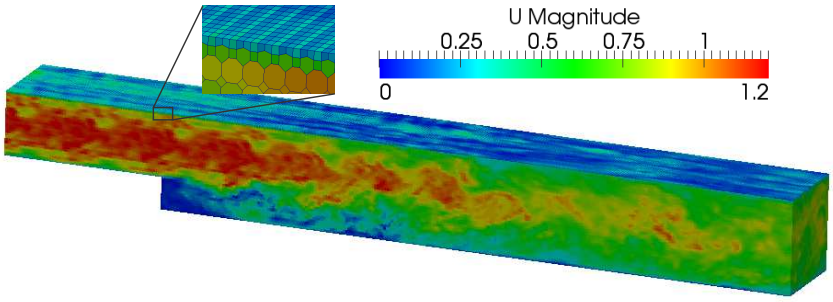
結果の妥当性評価によく用いられる．再付着距離の計算値は，約 $6H$ であり，実験結果と良く一致している．図 3.7 に，複数の異なる格子を用いて計算した $x = 6.0H$ における主流方向速度の時間平均値を笠木の実験結果と共に示す．格子解像度が増加するにつれ，計算結果が実験結果に近づいている．また，多面体格子を用いた結果も実験結果とおおむね一致しており，妥当な結果が得られている．以上より，本計算法により，六面体格子，多面体格子のように用いる格子の種類を問わず，非圧縮性単相乱流に対して，乱流構造を捉えた妥当な結果が得られると結論づけられる．



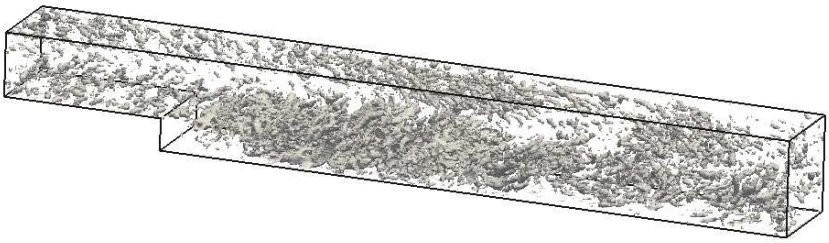
(a) Color contour of the velocity magnitude with the $15 \times 30 \times 45$ mesh



(b) Iso-surface of second invariant of gradient tensor of the velocity $Q = 1.0\,\mathrm{s}^{-2}$ with the $15 \times 30 \times 45$ mesh

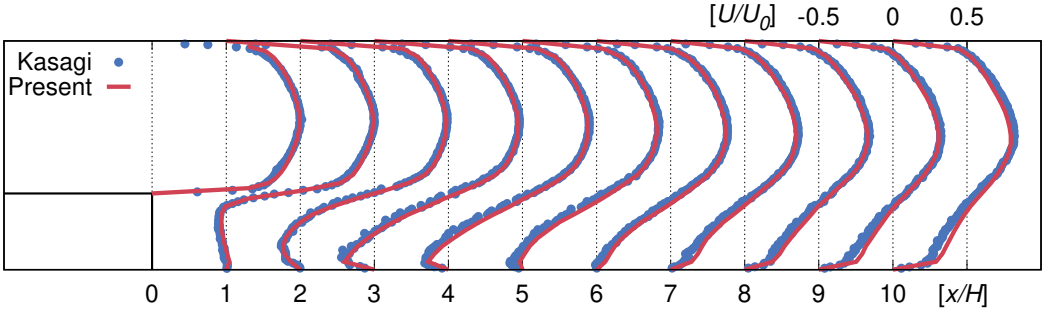


(c) Color contour of the velocity magnitude with the polyhedral mesh

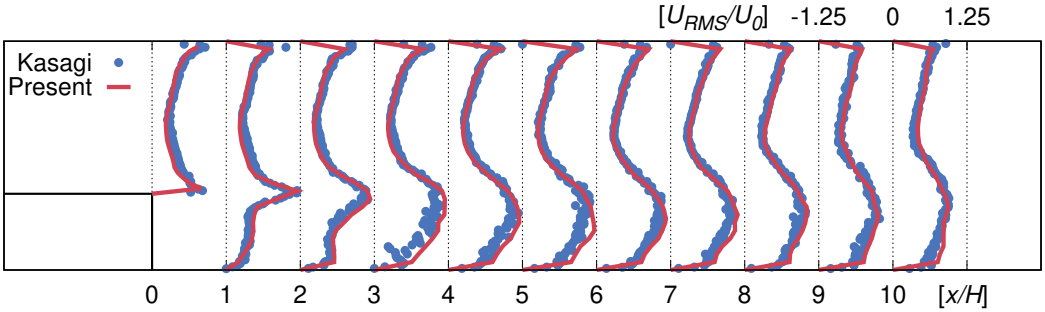


(d) Iso-surface of second invariant of gradient tensor of the velocity $Q = 1.0\,\mathrm{s}^{-2}$ with the polyhedral mesh

図 3.5: Instantaneous flow field with the backward-facing step



(a) Time averaged value



(b) Root mean square

図 3.6: Turbulent statistics of streamwise velocity component with the $15 \times 30 \times 45$ mesh

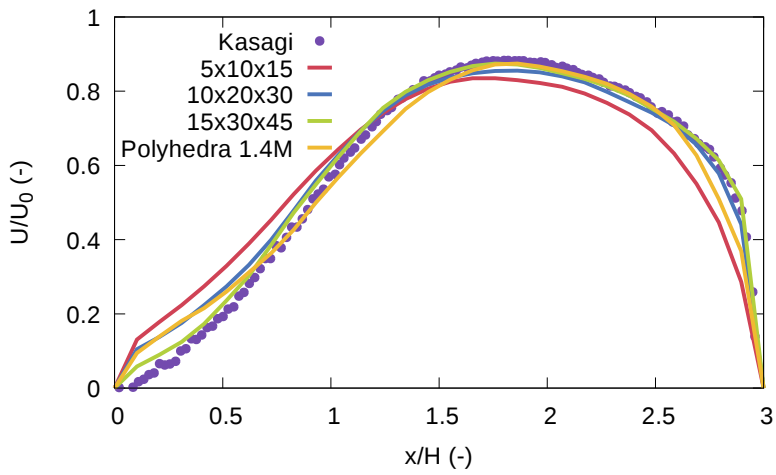


図 3.7: Mesh dependence in time averaged velocity at $x = 6.0H$

3.2.3　ダム崩壊

本計算法を用いて，ダム崩壊 [31, 102] を計算し，既往研究の実験結果と比較することにより，解の妥当性を評価した．計算の概要を図 3.8 に示す．計算領域は，$400\,\mathrm{mm} \times 150\,\mathrm{mm}$ であり，初期に $a \times 2a$（$a = 58\,\mathrm{mm}$）の大きさの水柱を計算領域の左下の隅に配置した．計算開始と同時に重力により水柱が崩壊し，水柱の高さが減少すると共に，水が x 軸正の方向に流れる．計算された水柱の高さと水の x 軸正の方向の先端位置の時間推移を Martin and Moyce による実験結果 [103] と比較した．x 方向と y 方向の格子数をそれぞれ 200，75 とした一様な格子（200×75）を計算に用いた．また，格子依存性を調査するために，格子数 50×19，100×38 の格子と 13,398 個の多角形からなる格子も用いた．境界は全面を壁とし，速度ゼロ，圧力勾配，温度勾配，液相のカラー関数の勾配をゼロとした．初期条件は領域全体で，$\boldsymbol{U} = (0, 0)\,\mathrm{m/s}$，$p = 101325\,\mathrm{Pa}$，$T = 288.15\,\mathrm{K}$ とし，水柱が存在する領域で $\alpha_\mathrm{l} = 1$，その他の領域で $\alpha_\mathrm{l} = 0$ とした．気相は完全に混合し，化学種の濃度は均一とみなせるため，便宜上，単一の化学種で構成されているとし，空気の物性値 $W_\mathrm{g} = 28.97 \times 10^{-3}\,\mathrm{kg\,mol^{-1}}$，$C_{\mathrm{p,\,g}} = 1007.0\,\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$，$\mu_\mathrm{g} = 1.8 \times 10^{-5}\,\mathrm{Pa\,s}$，$\lambda_\mathrm{g} = 2.6 \times 10^{-2}\,\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$ を与えた．液相も単一の化学種で構成されているとし，水の物性値 $\rho_{\mathrm{l},\,0} = 995\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$，$C_\mathrm{p} = 4181.0\,\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$，$\mu_l = 8.5 \times 10^{-4}\,\mathrm{Pa\,s}$，$\lambda_\mathrm{l} = 5.0 \times 10^{-1}\,\mathrm{J\,m^{-1}\,s^{-1}\,K^{-1}}$ を与えた．重力加速度は $\boldsymbol{g} = (0, -9.81)\,\mathrm{m\,s^{-2}}$ とした．

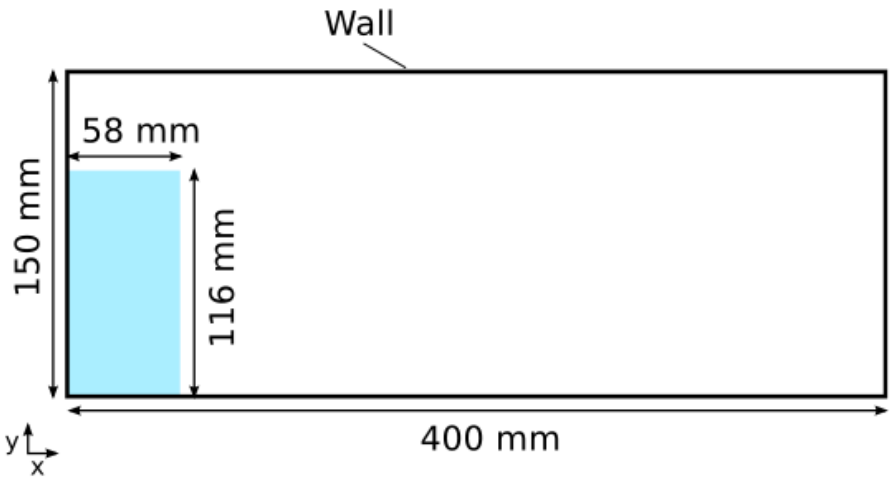
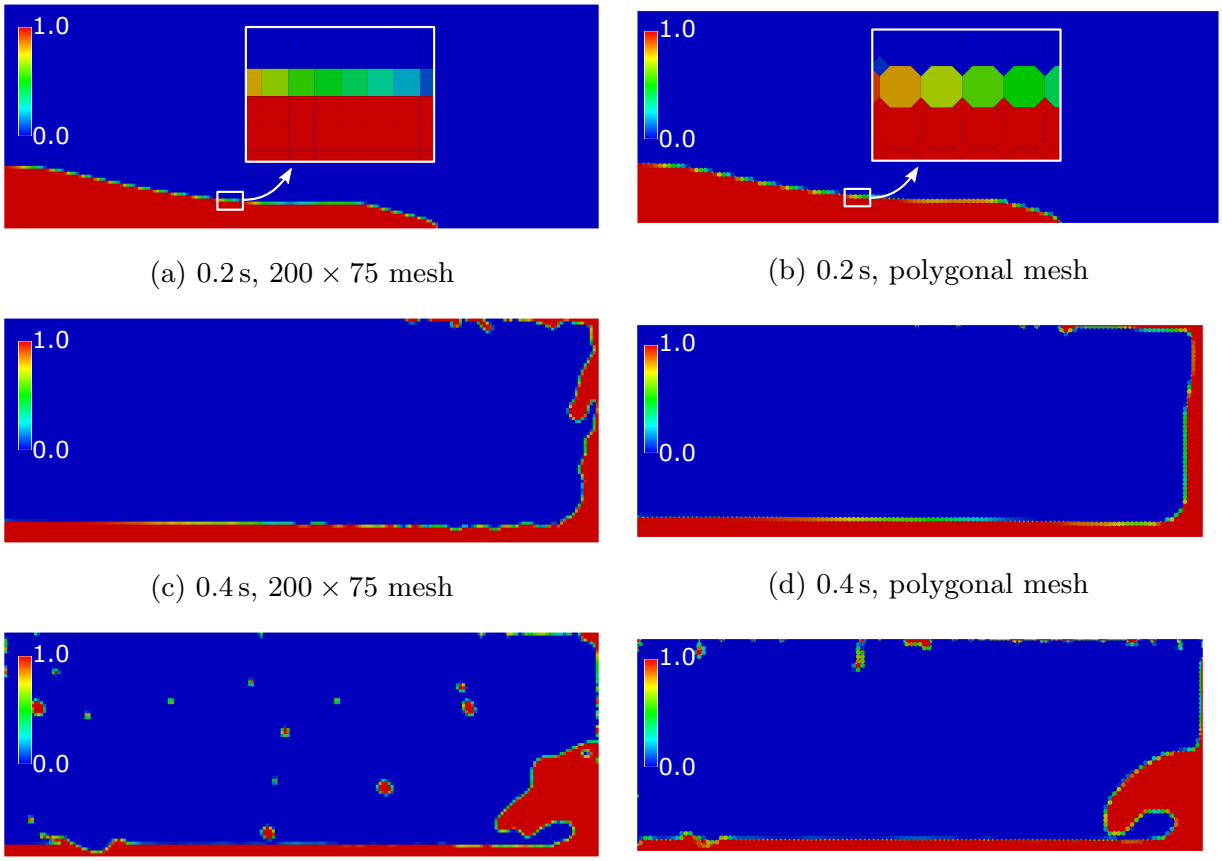


図 3.8: Schematic of flow field and initial condition of dam break

図 3.9 に，0.2，0.4，0.6 s における液相のカラー関数の分布を示す．時刻 0.2 s において，崩壊した水柱は床に拡がっている．そして，時刻 0.4 s では，右の壁に衝突した水が壁を伝って上昇している．その後，時刻 0.6 s において，上昇した水の一部は重力に従って下降して床面へと逆流している．本計算により，気液界面の大変形を捉えることができている．200×75 の四角形からなる一様な格子と多角形からなる格子の結果には，界面形状に若干の差異が見られるが，バルクの液相挙動は一致している．図 3.10 に，水柱の高さと水の x 軸正の方向の先端位置の変化を示す．時刻 t，高さ h，先端位置 z はそれぞれ $t\sqrt{g/a}$，$h/(2a)$，z/a と規格化し

た．格子解像度を変えても，多角形からなる格子を用いても，高さ，先端位置，共に，ほとんど変化せず，格子依存性の無い結果が得られている．計算された高さの時間推移は実験結果と良く一致している．一方，先端位置は実験結果よりも速く進展しているが，この傾向は他の研究 [31, 102] でも見られる．したがって，先端位置が実験結果と一致しないことは，本計算法に特有の問題ではない．以上より，本計算法により，四角形格子，多角形格子のように用いる格子の種類を問わず，非圧縮性気液二相流に対して，液相の運動を再現した妥当な結果が得られると結論づけられる．

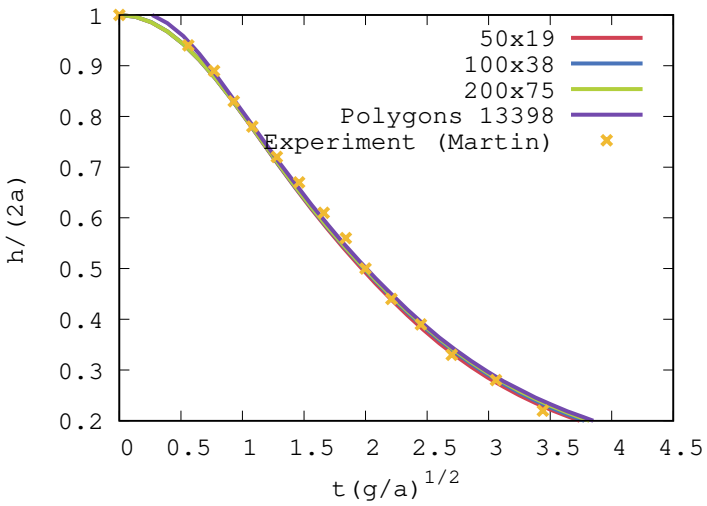


(a) 0.2 s, 200 × 75 mesh　(b) 0.2 s, polygonal mesh

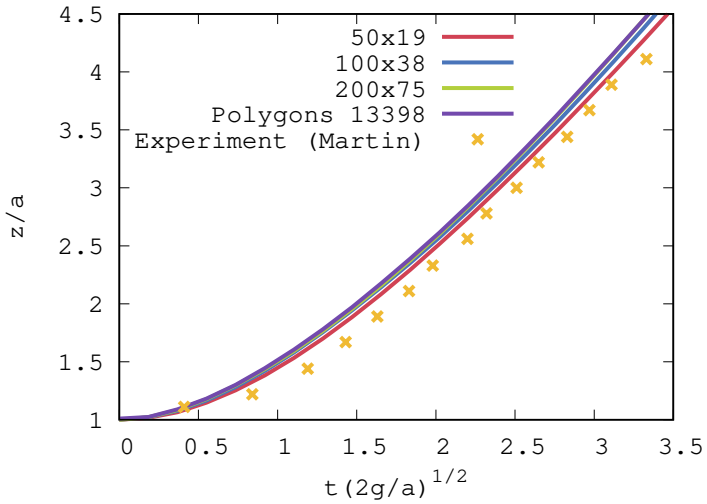
(c) 0.4 s, 200 × 75 mesh　(d) 0.4 s, polygonal mesh

(e) 0.6 s, 200 × 75 mesh　(f) 0.6 s, polygonal mesh

図 3.9: Time evolution of the water (red) and air (blue) configurations



(a) Height



(b) Leading edge position

図 3.10: Height and leading edge position of a water column

3.2.4　水浴に衝突する高速ガスジェット

本計算法を用いて，水浴に衝突する高速ガスジェットを計算し，既往研究の実験結果と比較することにより，解の妥当性を評価した．水浴に衝突するガスジェットの実験は，転炉の火点に関する研究において，火点形状を推定するためにしばしば実施される．この問題の流れは，圧縮性流れと非圧縮性流れが共存する気液二相流であり，第 3.2.1，3.2.2，3.2.3 節で扱った問題の特徴を全て備えている．図 3.11 に，問題の概要を示す．直径 159 mm の円筒容器に水が貯められており，容器の中心軸上にノズルが設置されている．ノズルの噴射口と水面の間の距離は 30.0 mm である．外径 5.0 mm のノズルの先端に設けられた径 0.5 mm の噴射孔から，標準温度 0°C，標準圧力 101325 Pa（STP）において，流量 $3.33 \times 10^{-3}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$ で噴射される N_2 ジェットにより，水面に凹み（キャビティ）が形成される．この時，ノズル出口でのジェットの速度は約 $200\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ の亜音速となる．ジェットのレイノルズ数は約 7000 であり，乱流である．

この問題は，既往研究 [54, 55] において，高速ジェットに起因する計算時間の増大と複雑性を避けるために，液相よりも上の面で領域を上下に 2 つに分割して計算されている．文献 [54]，[55] では，共に，ノズルを含む上の領域は圧縮性の単相流として扱われている．液相を含む下の領域の扱いは異なり，文献 [54] では，非圧縮性の気液二相流として扱われ，文献 [55] では，圧縮性の気液二相流として扱われた．両者とも，上の領域の計算で得られた高速ジェットの流れを時間平均化し，下の領域の流入境界条件として与えた．これにより，下の領域の計算において，高速ジェットをそのまま扱うのに比べて，気相流れの速度を抑制でき，計算時間が短縮される．しかしながら，上野らの実験 [6] ではキャビティが上下左右に振動することが観察されており，この方法では，非定常性を再現することが難しいと推測される．したがって，ここでは，計算領域を分割せずに，1 つの領域として計算した．乱流モデルには，RANS モデルの一つである k-ω SST モデル [104] および LES モデルの一つである Vreman モデル [99, 100]（付録 C 参照）を用いた．Vreman モデルのモデル係数は，推奨値 $c = 0.07$，$c_\mathrm{c} = 0.1$ [100] とした．乱流プラントル数は $\mathrm{Pr_t} = 1.0$ とした．

図 3.12 に計算領域とノズルおよび水面近傍の格子を示す．円筒容器の内部の三次元空間を計算領域とし，半径方向は円筒容器の内壁まで，下端は円筒容器の底，上端はノズルの噴射孔から 7.2 mm 上の水平断面とした．ノズルは内部構造まで反映し，外径 5.0 mm，内径 3.0 mm，ノズル噴射孔径 0.5 mm，ノズル内部から噴射孔までの直管部の長さ 1.0 mm とした．格子幅をノズル噴射孔が位置する計算領域の中心軸近傍および水面近傍で小さくとり，ノズル噴射孔の半径方向の格子幅を 0.0167 mm，水面近傍の鉛直方向の格子幅を 0.4 mm とした．計算領域全体の格子数は 190 万である．

境界条件は次のように与えた．流入境界では，液相のカラー関数，質量流量，温度，化学種の質量分率を規定し，圧力は境界に隣接する格子の値から外挿した．k-ω SST モデルを用いた場合には，これらに加え，乱流運動エネルギー，比散逸率も規定した．液相のカラー関数はゼロとし，質量流量は，上野らの実験条件と一致するように与えた．温度は，300 K とした．

化学種の質量分率は N_2 の質量分率を 1 とした．乱流運動エネルギーは乱流強度を 5% として与えた．比散逸率は混合長をノズル径の 1/10 として与えた．上部境界は，自由流入出境界とし，液相のカラー関数，速度，温度，化学種の質量分率の境界面に垂直な方向の勾配をゼロとし，全圧を 101325 Pa で規定した．k-ω SST モデルを用いた場合には，これらに加え，乱流運動エネルギー，比散逸率の境界面に垂直な方向の勾配をゼロとした．壁境界では，速度をゼロとし，断熱とした．ただし，運動量保存式を計算する際には壁関数 [98] で計算される応力を課した．液相のカラー関数，化学種の質量分率については，境界面に垂直な方向の勾配をゼロとした．k-ω SST モデルを用いた場合には，これらに加え，乱流運動エネルギーの境界面に垂直な方向の勾配をゼロとし，比散逸率には壁関数 [105] を適用した．

流体の物性値は次のように与えた．気相は N_2 とし，$W_{\mathrm{g}} = 28.014 \times 10^{-3}\,\mathrm{kg\,mol^{-1}}$，$C_{\mathrm{p,\,g}} = 1043.0\,\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$ とした．N_2 の粘性係数は Sutherland の式で与えた．熱伝導率は，Euken モデルで計算した．液相は水とし，$\rho_{\mathrm{l,\,0}} = 995\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$，$C_{\mathrm{p,\,l}} = 4181.0\,\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$，$\mu_{\mathrm{l}} = 8.5 \times 10^{-4}\,\mathrm{Pa\,s}$，$\lambda_{\mathrm{l}} = 0.5\,\mathrm{J\,m^{-1}\,s^{-1}\,K^{-1}}$ を与えた．

計算時間の短縮のため，まず格子数 24 万の粗い格子を用いて流れを発達させた．粗い格子で得られた結果を格子数 190 万の細かい格子にマッピングし，その時刻を $t = 0.0\,\mathrm{s}$ として，$t = 0.5\,\mathrm{s}$ までの計算をした．細かい格子において，$t = 0.1\,\mathrm{s}$ で流れは準定常状態になったため，残りの 0.4 s 間のデータを使って時間平均値を算出した．

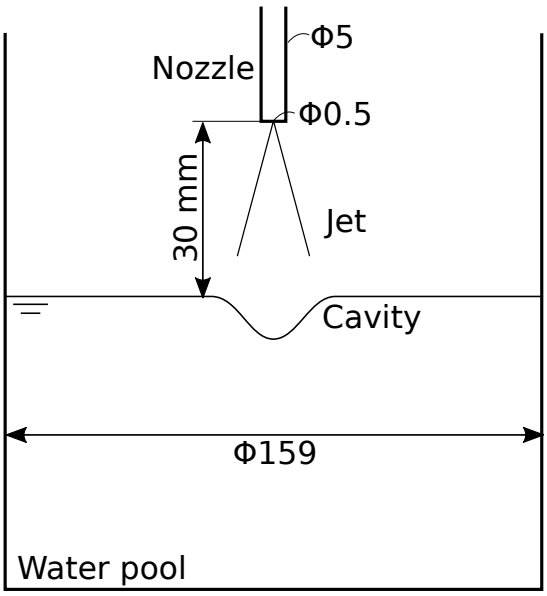


図 3.11: Schematic of subsonic jet impinging on a water pool problem

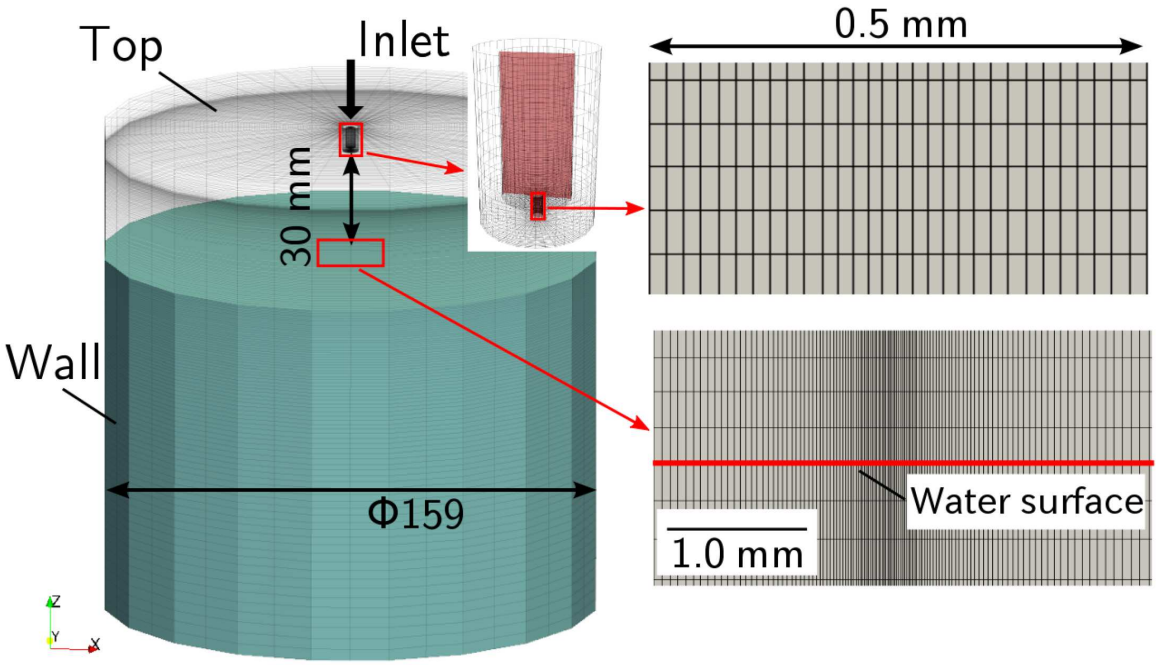
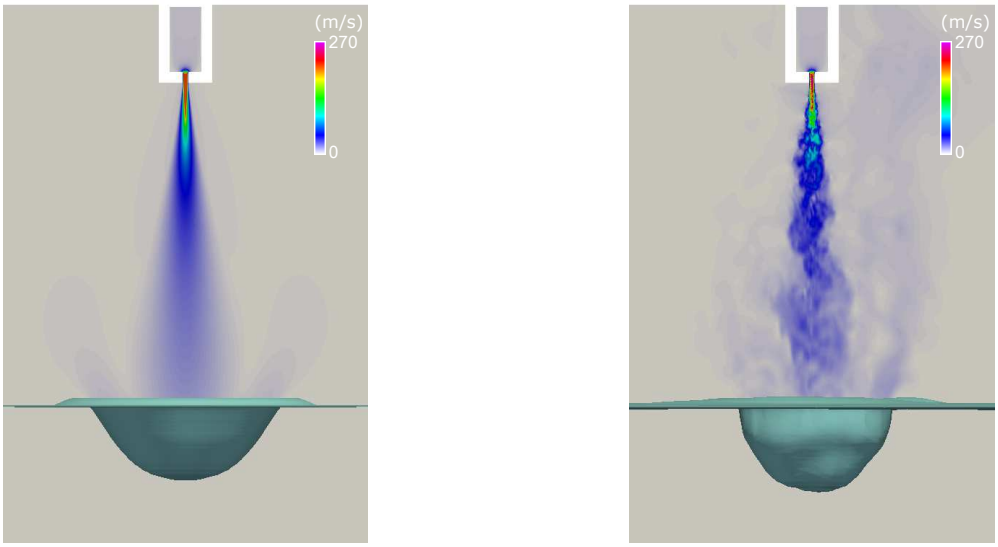


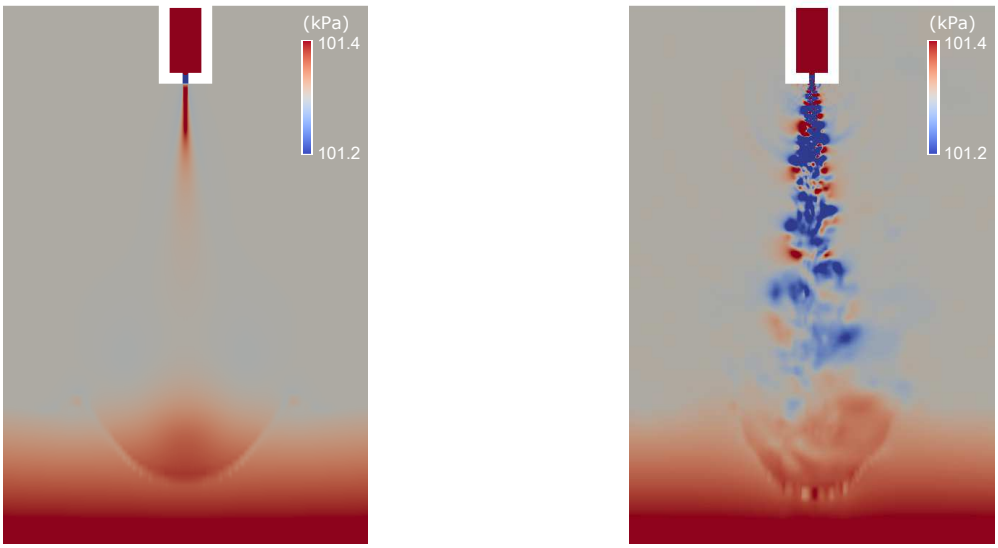
図 3.12: Calculation region and grid

図 3.13 に計算領域の中央断面における速度分布と液面の三次元形状，図 3.14 に中央断面における圧力分布を示す．ノズルから速度 270 m s^{-1} で噴出したジェットによりキャビティが形成されている．k-ω SST モデルを用いた結果では，ジェットは振動することなく，拡がりながら液面に衝突している．一方，Vreman モデルを用いた結果では，ジェットは振動している．Vreman モデルを用いた場合，ノズルから噴出した直後のジェットの外縁に渦列が発生しており，渦列が周囲の気体を巻き込みながら発達している．この渦は，軸対称性を持つ渦輪の状態で発生するが，発達するにつれ，崩壊し，軸対称性が崩れて，ジェットの振動を引き起こすことが知られており [106]，本結果においてもそのような現象が再現されている．k-ω SST モデルを用いた場合，ジェットの外縁に渦列は見られず，乱流モデルによる渦粘性として，渦列が考慮されている．図 3.14 の圧力分布にも両モデルの違いが表れている．k-ω SST モデルを用いた結果では，圧力分布に構造が見られないのに対し，Vreman モデルを用いた結果では，圧力が交互に増減する構造が表れている．どちらの乱流モデルを用いても，キャビティ内部では，ジェットの液面への衝突によって圧力が増加しており，その圧力は，静水圧と釣り合っている．



(a) k-ω SST model　　(b) Vreman model

図 3.13: Velocity profile on the center cross section of the region and shape of water surface in 3D; The surface colored with the light blue is iso-surface of $\alpha = 0.5$

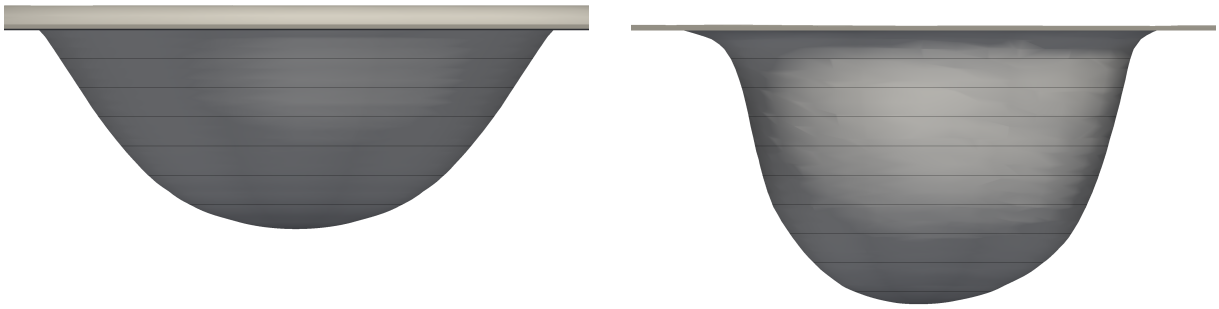


(a) k-ω SST model　　(b) Vreman model

図 3.14: Pressure profile on the center cross section of the region

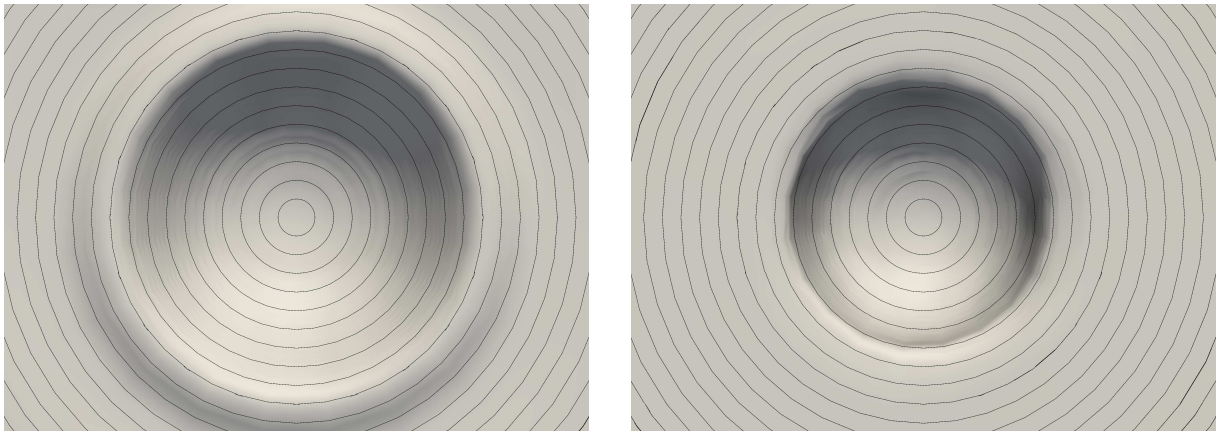
図 3.15，3.16 に，時間平均したキャビティ形状を示す．キャビティ形状は，ほぼ軸対称であり，物理的に妥当な結果となっている．k-ω SST モデルを用いた場合，キャビティ深さは 6.8 mm，キャビティ深さの 1/2 の深さにおけるキャビティ径（キャビティ径）は 13.0 mm である．一方，Vreman モデルを用いた場合，時間平均したキャビティ深さは 9.4 mm，キャビティ径は 12.0 mm であり，k-ω SST モデルの結果よりも深く，径は小さい．これらに対し，上野らの実験 [6] で測定されたキャビティ深さは 9.2 mm，キャビティ径は 12 mm であり，

Vreman モデルによる結果の方がキャビティ形状の再現性が良い．また，図 3.17 に示すように，k-ω SST モデルを用いた場合は，キャビティ深さの変動幅が小さく，測定結果と一致しない．一方，Vreman モデルを用いた場合のキャビティ深さの計算値は周期 0.1 s 程度，振幅 2 mm 程度で増減し，増減幅，周期ともに測定結果と一致している．



(a) k-ω SST model　　(b) Vreman model

図 3.15: Side view of time-averaged cavity shape; Black lines are contours of z coordinate of 1.0 mm in the intervals



(a) k-ω SST model　　(b) Vreman model

図 3.16: Top view of time-averaged cavity shape; Black lines are contours of $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ coordinate of 1.0 mm in the intervals

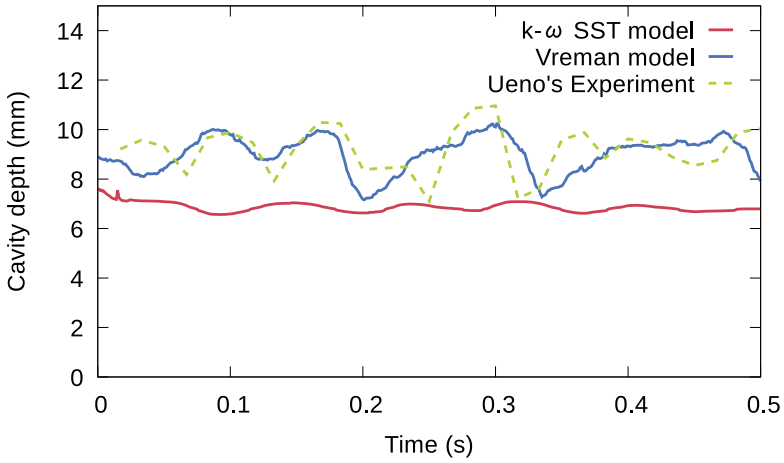


図 3.17: Time transition of the cavity depth

以上より，本計算法に RANS モデルの一つである k-ω SST モデルを組み合わせることで，時間平均的な現象を定性的に再現できるが，定量的には，ジェットによって水面に形成されるキャビティの平均深さは約 25% 過小評価され，直径は約 10% 過大評価されることがわかった．また，ジェットの非定常性を捉えられないため，キャビティ深さの非定常な形状変化を再現することは困難である．一方，本計算法に LES モデルの一つである Vreman モデルを組み合わせることで，キャビティ深さ，キャビティ径に加え，キャビティ深さの非定常な変化まで再現した妥当な結果が得られることがわかった．

3.3　まとめ

第 2 章で述べた計算法で，亜音速単相流，非圧縮性単相乱流，非圧縮性気液二相流の代表的な問題を計算し，流体計算の妥当性を評価した結果を以下にまとめる．

- 超音速および亜音速外部流れの一つである円弧状バンプを越える流れの計算において，質量保存誤差は，0.01–0.1% と小さく，保存形の質量保存式を用いる圧力ベースの解法とほぼ同じ結果が得られた．
- 非圧縮性単相乱流の一つである後ろ向きステップ流れの計算において，乱流モデルに LES モデルの一つである Vreman モデルを用いることで，ストリークや小さな渦などの乱流構造を捉えることが可能であり，速度の時間平均値と標準偏差については実験結果と良く一致する結果が得られた．
- 非圧縮性気液二相流の一つであるダム崩壊の計算において，従来の非圧縮性 VOF 法や MPS 法などの計算法と同等の精度で水柱の界面位置が再現された．
- 任意多面体格子からなる非構造格子を用いた計算においても，妥当な結果が得られた．

以上より，本計算法は，圧縮性流体，乱流，気液二相流に対応しており，幅広い流れを扱うことが可能である．これらの結果により，第 4 章で議論する脱炭反応モデルを評価するのに十分

な計算法が確立されたといえる．

本計算法を用いて，転炉に対する水モデル実験としてしばしば研究対象とされる水浴に衝突する高速ガスジェットを計算した結果を以下にまとめる．

- RANS モデルの一つである k-ω SST モデルを用いると，時間平均的な現象を定性的に再現できる．しかしながら，定量的には，ジェットによって水面に形成されるキャビティの平均深さは約 25% 過小評価され，直径は約 10% 過大評価される．また，ジェットの非定常性を捉えられないため，キャビティ深さの非定常な形状変化を再現することは困難である．
- LES モデルの一つである Vreman モデルを用いることで，時間平均的な現象を定性的に再現できるだけでなく，ジェットによって水面に形成されるキャビティの平均深さ，直径に加え，キャビティ深さの非定常な変化まで定量的に再現できる．

以上より，本計算法に RANS モデルを組み合わせると，水浴に衝突する高速ガスジェットの時間平均的な現象を定性的に再現でき，本計算法に LES モデルを組み合わせると，時間平均的な現象だけでなく，非定常な現象も定量的に再現できることが確認された．これらの結果より，転炉に対する計算においても，本計算法に，RANS モデル，LES モデルを組み合わせると，それぞれ水モデルでの結果と同様の傾向を持つ結果となることが示唆される．しかしながら，ここで扱った高速ガスジェットは亜音速であるのに対し，転炉では超音速ガスジェットが用いられるため，転炉に対する計算に LES モデルを適用することは困難である．LES モデルを超音速流れに適用するためには，衝撃波による不連続面での数値振動を抑制しつつ，乱流によって生じる小さな渦などの細かな構造を解像する必要があり，衝撃波捕獲法と呼ばれる手法を確立する必要がある [107, 108]．また，脱炭反応モデルで必要とされる物質伝達係数を計算するための eddy cell モデル [88] は RANS モデルと共に用いられてきており [72, 109, 110, 111, 112, 113]，LES モデルと共に用いた研究例はないため，サブグリッドスケールモデルとしての基礎的な検証を伴う開発が必要である．したがって，第 5 章で議論する小型試験転炉における脱炭のシミュレーションでは，RANS モデルを適用した場合の高速ガスジェットと溶鉄浴との流動の相互作用の評価における誤差を許容し，本計算法に RANS モデルを組み合わせて用いる．

第 4 章

脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算の妥当性評価

本章では，第 2 章で提案した計算法を用いて，坩堝内の溶鉄への CO_2–CO 混合ガスジェットの吹き付けによる脱炭 [3] を計算する．第 3 章で確認したように，本計算法を用いることで妥当な流動場が得られるという前提の下，坩堝全体の脱炭速度を実測された文献値と比較することにより，脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算に関する妥当性を評価する．第 1 章で述べたように，O_2 による脱炭の実験では，O_2 による脱炭，CO_2 による脱炭，二次燃焼の各反応速度を求めることが難しい．したがって，脱炭速度を実験的に求めることができる CO_2 による脱炭についてのみ，脱炭反応モデルの妥当性を評価する．

本章では，脱炭反応モデルにおいて，式 (2.85) で表される O_2 による質量変化速度などの O_2 に関する項は全てゼロである．また，式 (2.46)–(2.52) で表される二次燃焼に関する計算も行わない．

4.1　計算条件

図 4.1a に示す装置を使った Nomura and Mori による CO_2 による溶鉄の脱炭実験 [3] を解析した．この実験は，転炉の火点における脱炭現象を理解するために実施された要素実験である．実験では，内径 4.0，または 10.0 mm のノズルから，内径 40 mm，高さ 100 mm の坩堝内の溶鉄 0.4 kg に，CO_2，CO からなる混合ガスが吹き付けられた．溶鉄中の炭素濃度は 1.0 mass% である．溶鉄は，誘導加熱により温度 1873 K に維持された．ノズルは，先端に設けられたガス噴出孔が溶鉄表面から 5.0 mm となるよう坩堝の中心軸上に設置された．一定時間間隔で溶鉄をサンプリングし，溶鉄中に含まれる炭素濃度を分析することにより，脱炭速度が推定された．ガス流量は，標準温度 0°C，標準圧力 101325 Pa（STP）において，3.3–$28.3 \times 10^{-6}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$ の範囲で設定された．レイノルズ数は 150–1000 であることから，流れは，層流だと推測される．吹き付けガス中の CO_2 のモル分率は 0.0625–1.0 の範囲で設定された．これら実験条件を図 4.1c にまとめる．

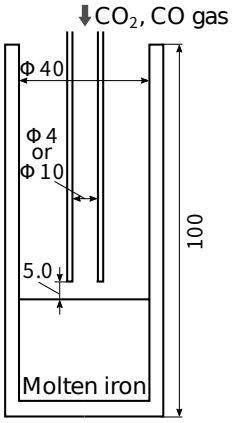
計算格子を図 4.1b に示す．格子は，二次元軸対称であり，ノズル先端のガス噴出孔と気液

界面で格子サイズが小さくなるように作成した．格子数は 7,920 である．ノズルの内径，坩堝の内径と高さ，ノズルと坩堝の配置を再現した．以下に述べる境界条件，初期条件の下での 10 s 間のシミュレーションでは，バルクの溶鉄は 1873 K でほぼ変わらないため，誘導加熱は考慮しなかった．

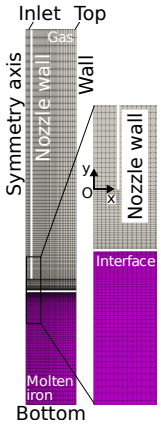
境界条件は次のように与えた．流入境界では，液相のカラー関数，質量流量，温度，化学種の質量分率を与えた．液相のカラー関数はゼロとし，質量流量と化学種の質量分率は実験条件と一致するように与えた．温度は，300 K とした．圧力は，境界面に垂直な方向の勾配をゼロとした．上部境界は自由流入出境界とし，液相のカラー関数，速度，温度，化学種の質量分率の境界面に垂直な勾配をゼロとし，全圧を 101325 Pa に固定した．壁と炉底境界では，速度は滑りなし条件，温度は断熱条件で与え，液相のカラー関数，圧力，化学種の質量分率は境界面に垂直な勾配をゼロとした．

初期条件として，坩堝内の溶鉄質量が 0.4 kg となるように液相のカラー関数を設定し，計算領域全体で，速度ゼロ，温度 1873 K を与えた．初期圧力は，気相では 101325 Pa，液相では溶鉄の静圧分布とした．気相の化学種の質量分率は，吹付けガスの値（$Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{CO_2}} = 1.0$，$Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{CO}} = 0.0$ や $Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{CO_2}} = 0.786$，$Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{CO}} = 0.214$ など）を与えた．液相における初期の化学種の質量分率は，炭素 1.0%，鉄 99.0% とした．

カラー関数の輸送方程式を除く全ての方程式の空間離散化について，移流項は Sweby 制限関数 [114] による TVD スキーム，拡散項は，二次精度中心差分法を用いた．時間刻みは，坩堝全体で積分した脱炭反応速度の数値振動を抑制できるように小さくとった．計算条件によってその値は異なるが，時間刻みは最小で 1×10^{-5} s とした．



(a) Schematic



(b) Computational grid

Mole fraction of CO_2 in blowing gas (—)	1.0, 0.7, 0.6, 0.0909, 0.0625
Gas flow rate at STP (10^{-6} m^3/s)	3.3—28.3
Temperature of blowing gas (K)	300
Pressure in atmosphere (kPa)	101.325
Weight of molten iron (kg)	0.4
Temperature of molten iron (K)	1873
Initial mass percent of carbon (%)	1.0

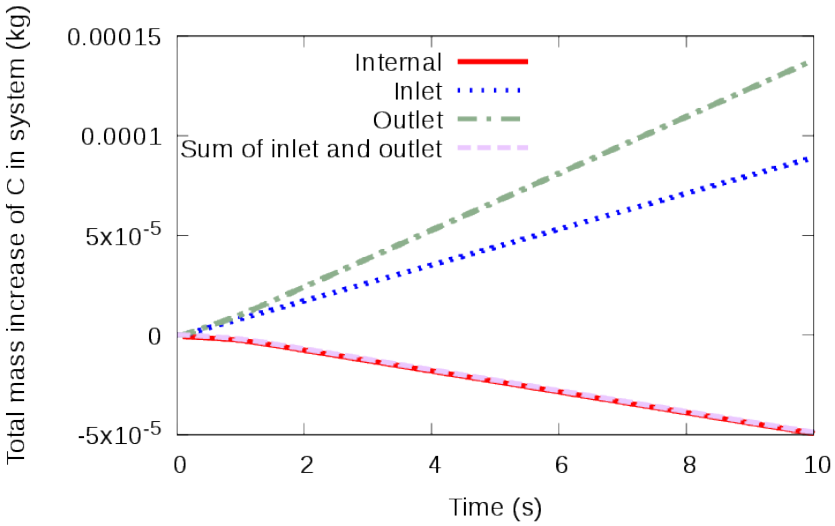
(c) Conditions of simulation and experiment

図 4.1: Experimental apparatus and conditions of Nomura and Mori [3]

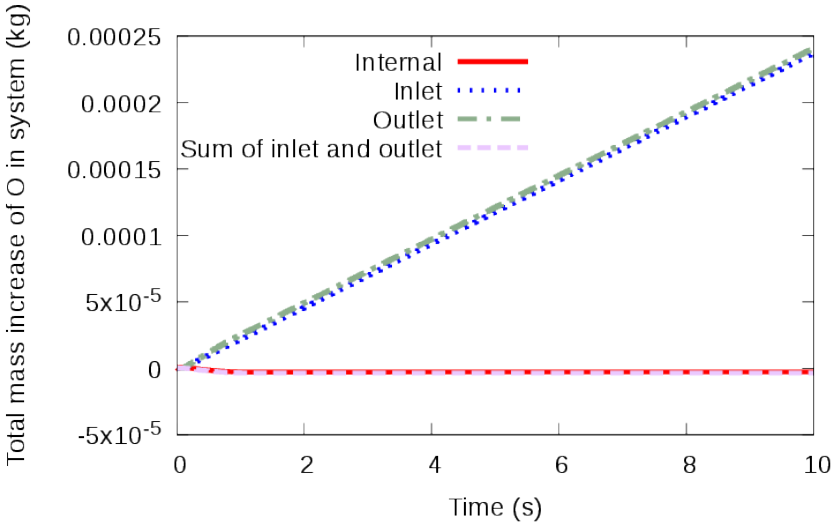
4.2　結果と考察

4.2.1　質量保存性と格子収束性

図 4.2 に，C と O の流入，流出の収支と系全体の質量増加を示す．$t = 10\,\mathrm{s}$ における C と O の質量保存誤差は，流入総質量の 0.5 % 以内に収まっており，無視可能なほど小さい．物理量の時間変化は，2 から 10 s までの間で一定であり，$t = 10\,\mathrm{s}$ においては，定常状態になっている．



(a) C



(b) O

図 4.2: Comparison of budget of inlet and outlet flow rates to total mass increase in the system for C and O, the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm, the blowing gas was pure CO_2, and the gas flow rate was $1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$ at the STP; the model with finite reaction rate for adsorption reaction of CO_2

図 4.3 に，格子間隔と坩堝全体の脱炭速度との関係を示す．坩堝全体の脱炭速度は，$t = 10\,\mathrm{s}$ において，$-\mathcal{R}^{\mathrm{C}}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}} V$ を全セルに渡って足し合わせて求めた．格子間隔が変化しても，脱炭速度の変化は小さい．元の格子で規格化した格子間隔 Δ_{cell} が 0.5 から 1.5 の間での脱炭速度の変化は 3% 以内となった．本計算では，$\Delta_{\mathrm{cell}} = 1.0$ の格子を用いており，格子にほぼ依存しない結果が得られている．

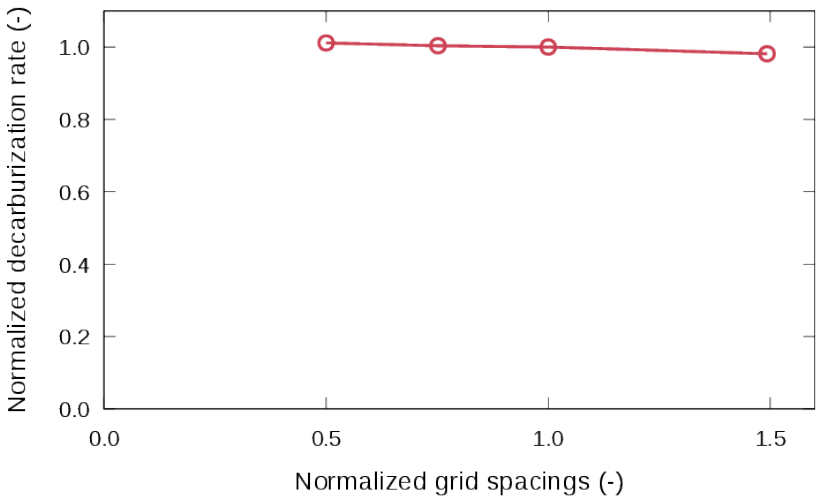
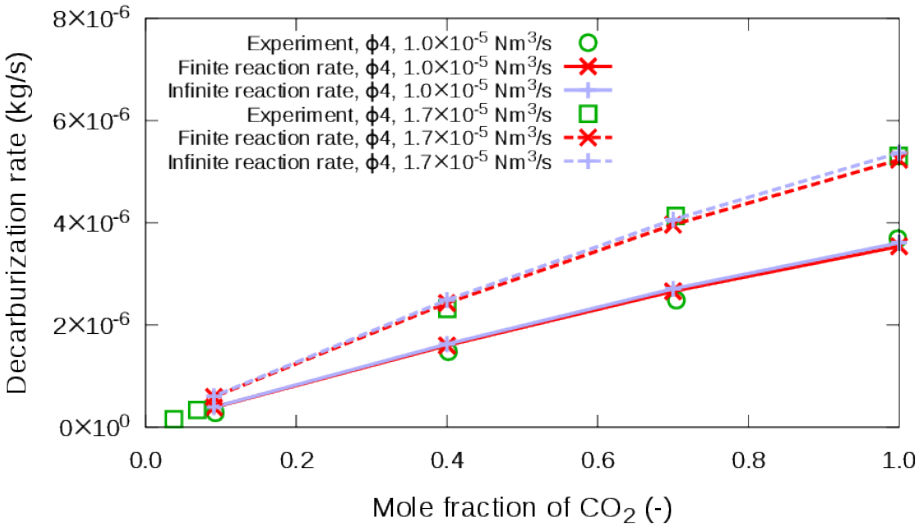


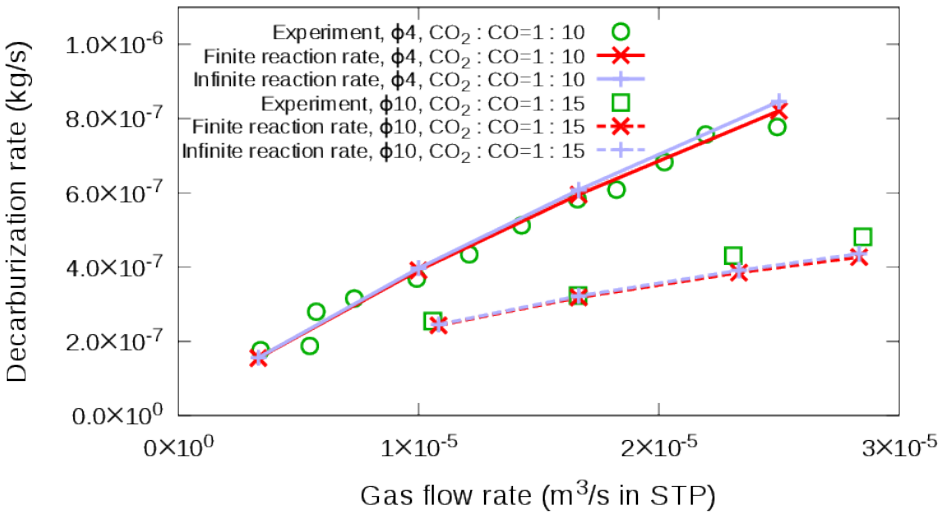
図 4.3: Relationship between decarburization rate and normalized grid spacings; the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm, the blowing gas was pure CO_2, and the gas flow rate was $1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$ at the STP; the model with finite reaction rate for adsorption reaction of CO_2

4.2.2　要素実験との比較による数値計算法の検証と脱炭反応モデルの影響

図 4.4 に坩堝全体の脱炭速度の計算値と実験値を示す．計算値は，CO_2 の解離吸着反応に対して式 (2.74) の有限反応速度，式 (2.92) の無限反応速度を適用した 2 つの結果である．両モデルとも定量的に実験結果を再現できている．計算結果と実験結果との差異は実験における測定の不確かさの範囲内であるとみなせる．したがって，CO_2 の解離吸着反応の反応速度は，坩堝全体の脱炭速度には影響を与えないことが分かる．また，両モデルとも，転炉で生じていると推定される高 CO_2 濃度 [62] の場合においても，脱炭速度を精度良く予測できている．



(a) Relationship between molar fraction of CO_2 in gas jet and decarburization rate



(b) Relationship between gas flow rate and decarburization rate

図 4.4: Comparison of calculated and experimental values [3] of decarburization rates

ガス流量と脱炭反応効率との関係を図 4.5 に示す．ここで，脱炭反応効率 η (–) は下記の式

で定義される．

$$\eta = \frac{\text{脱炭反応によって消費された } CO_2 \text{ の質量}}{\text{供給された } CO_2 \text{ の質量}} \tag{4.1}$$

脱炭反応効率の計算値は 0.6–0.9 であり，ガス流量の増加と共に減少している．その傾向は実験結果 [3] と一致している．

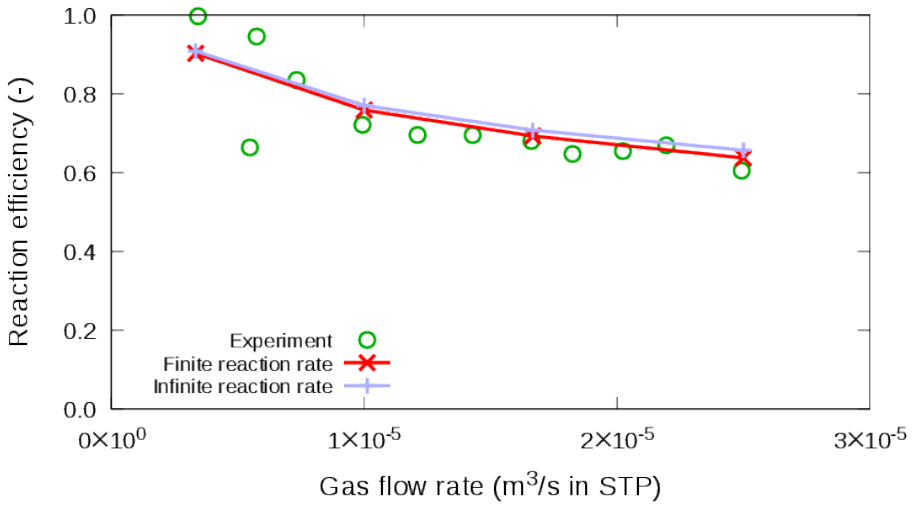


図 4.5: Relationship between gas flow rate and reaction efficiency; the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm, the blowing gas was mixture of CO_2 and CO in the ratio of 1 : 10

図 4.6 に，$t = 10\,\mathrm{s}$ における速度，温度および CO_2，CO，C の質量分率の二次元分布を示す．気相において，CO_2 ガスジェットは溶鉄に衝突した後，ほぼ平坦な気液界面に沿って半径方向に拡がりながら，脱炭反応によって消費される．脱炭反応によって発生した CO ガスは，半径方向に移流され，徐々にその濃度が増加する．液相においては，脱炭反応によって低濃度となった C が半径方向に移流され，坩堝の壁に衝突し，下方へ流れる．液相中の速度と温度の空間的な変化は気相に比べ，非常に小さい．ガス流量が増加すると，図 4.5 に示したように脱炭反応効率が減少するため，坩堝全体の CO_2 の濃度が増加する．ガスジェット中の CO_2 濃度が増加すると，脱炭反応によって正味のガス流量が増加するため，気液界面から上昇する速度が増加する．またこの時，CO_2 による脱炭の吸熱反応により，温度は減少する．これらの結果から，流動–反応の相互作用は無視できないことがわかる．

図 4.7 に，$t = 10\,\mathrm{s}$ における気液界面を含むセル中の各化学種の単位面積あたりの反応速度の半径方向の分布を示す．各化学種の反応速度は，$\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{g,l-g}} V/A$，$-\mathcal{R}^{\mathrm{X}}_{\mathrm{l,l-g}} V/A$ として求めた．流量，CO_2 濃度の条件に依存して，反応速度は変化するが，分布の形状には大きな違いが見られない．有限反応速度を用いると，無限反応速度を用いた場合に比べ，ジェットの衝突領域における反応速度が減少している．

図 4.8 に半径方向の単位長さあたりの脱炭速度の半径方向分布を示す．この結果は，図 4.7 の C の反応速度を周方向に積分して求めた．図 4.8d を見ると，有限反応速度を用いたモデル

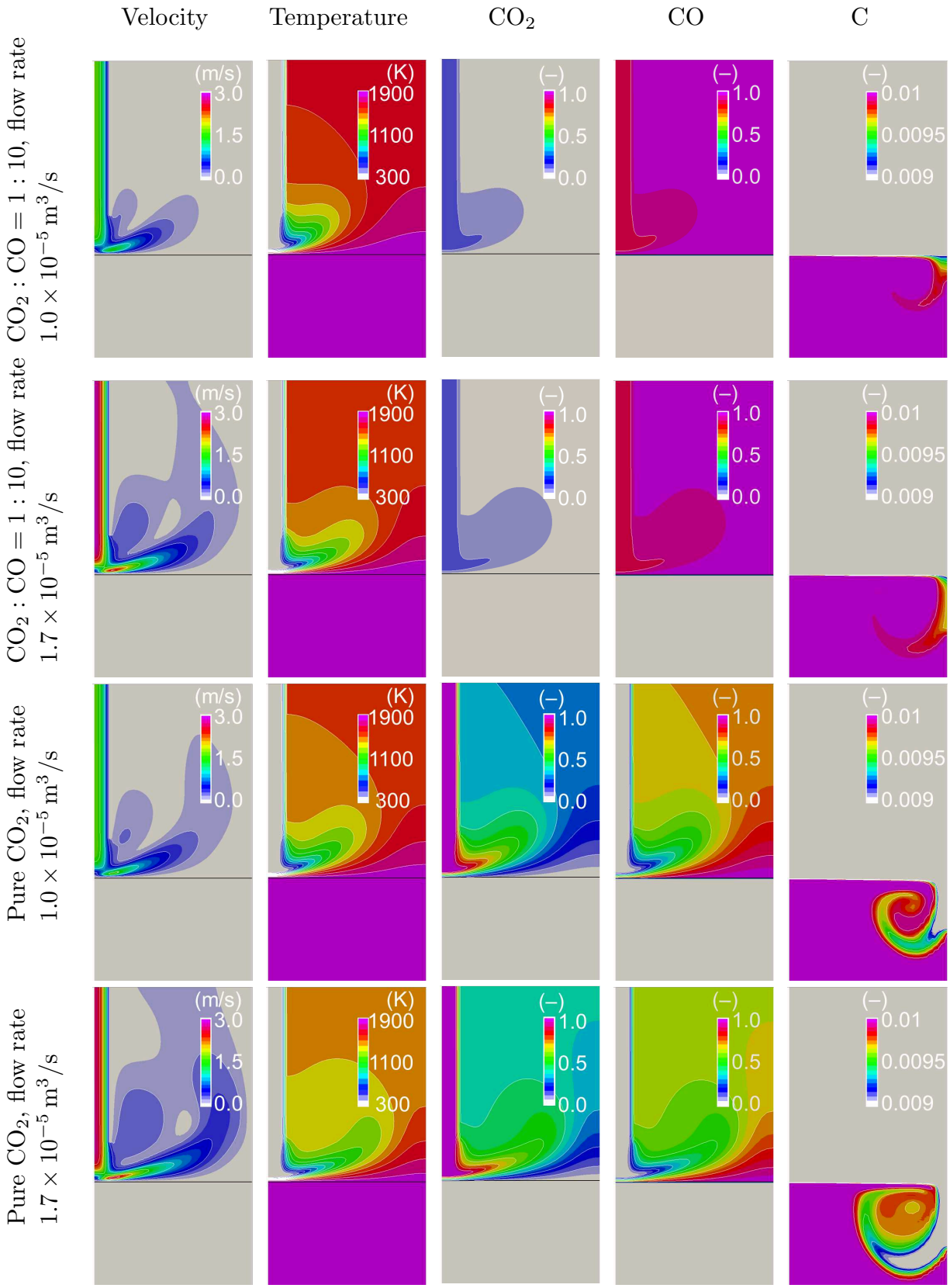
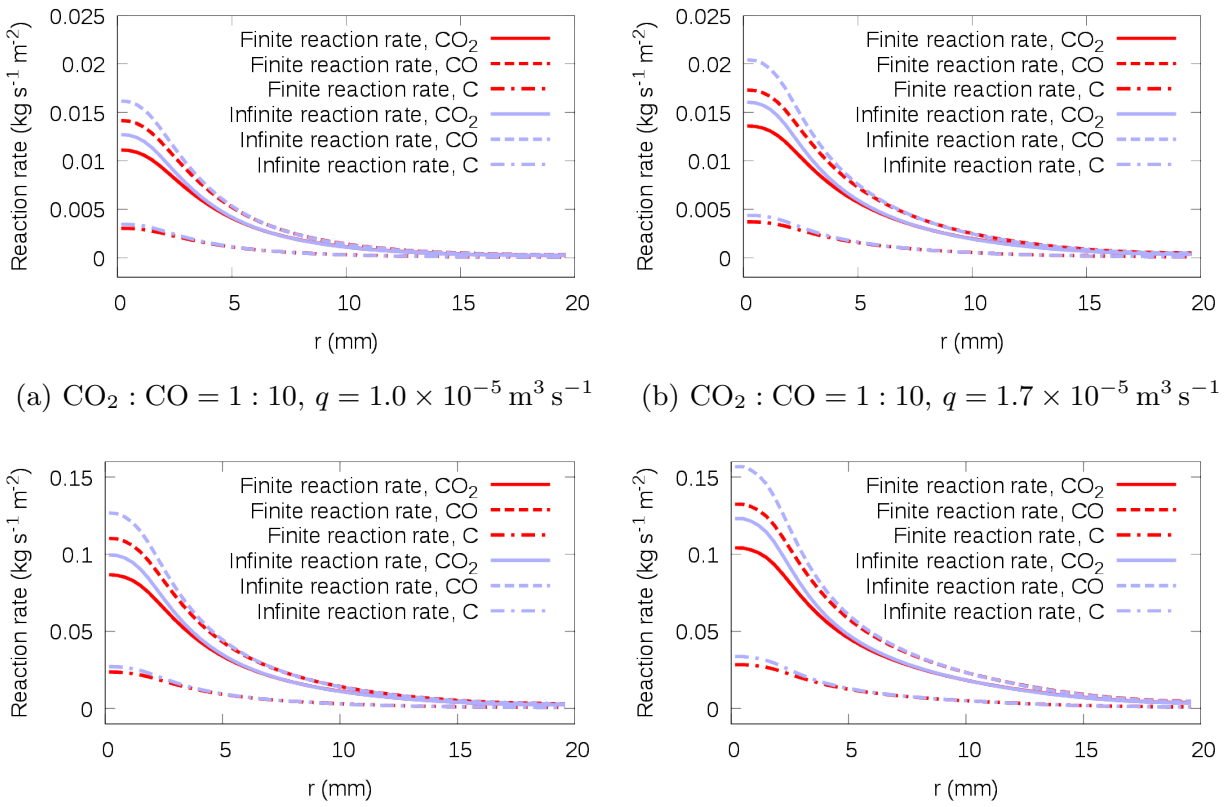


図 4.6: Distributions of velocity, temperature, and mass fraction of chemical species at $t = 10\,s$; black line is gas–liquid interface; the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm; the model with finite reaction rate for adsorption reaction of CO_2

で計算された脱炭速度は，半径 10 mm 未満の領域において，無限反応速度を用いたモデルで計算された値よりも小さく，半径 10 mm より大きい領域では，無限反応速度を用いたモデルで計算された値よりも大きい．つまり，半径 10 mm を境にそれぞれのモデルで計算された脱炭速度の大小関係が逆転している．他の条件においても，ある半径位置で両モデルの脱炭速度の大小関係が逆転している．有限反応速度を用いたモデルでは，式 (2.74)，(2.75) からわかるように，温度が増加すると脱炭速度が増加する．一方，無限反応速度を用いたモデルでは，脱炭速度に温度依存性がない．常温の CO_2–CO 混合ガスが坩堝の中心軸上の気液界面に吹き付けられるため，気液界面において，半径の小さい場所では，温度が低く，半径の大きい場所では，温度が高くなる．両モデルとも，脱炭速度は界面セルにおける CO_2 濃度の減少と共に減少するが，有限反応速度を用いたモデルでは，半径の大きい温度の高い場所において，反応速度係数が増加し，その地点での CO_2 濃度が無限反応速度モデルの濃度よりも高いため，ある半径位置で両モデルの脱炭速度の大小関係が逆転したと考えられる．このように，CO_2 の解離吸着反応の有限反応速度を考慮すると，脱炭における局所的な現象に影響を与えることがわかる．



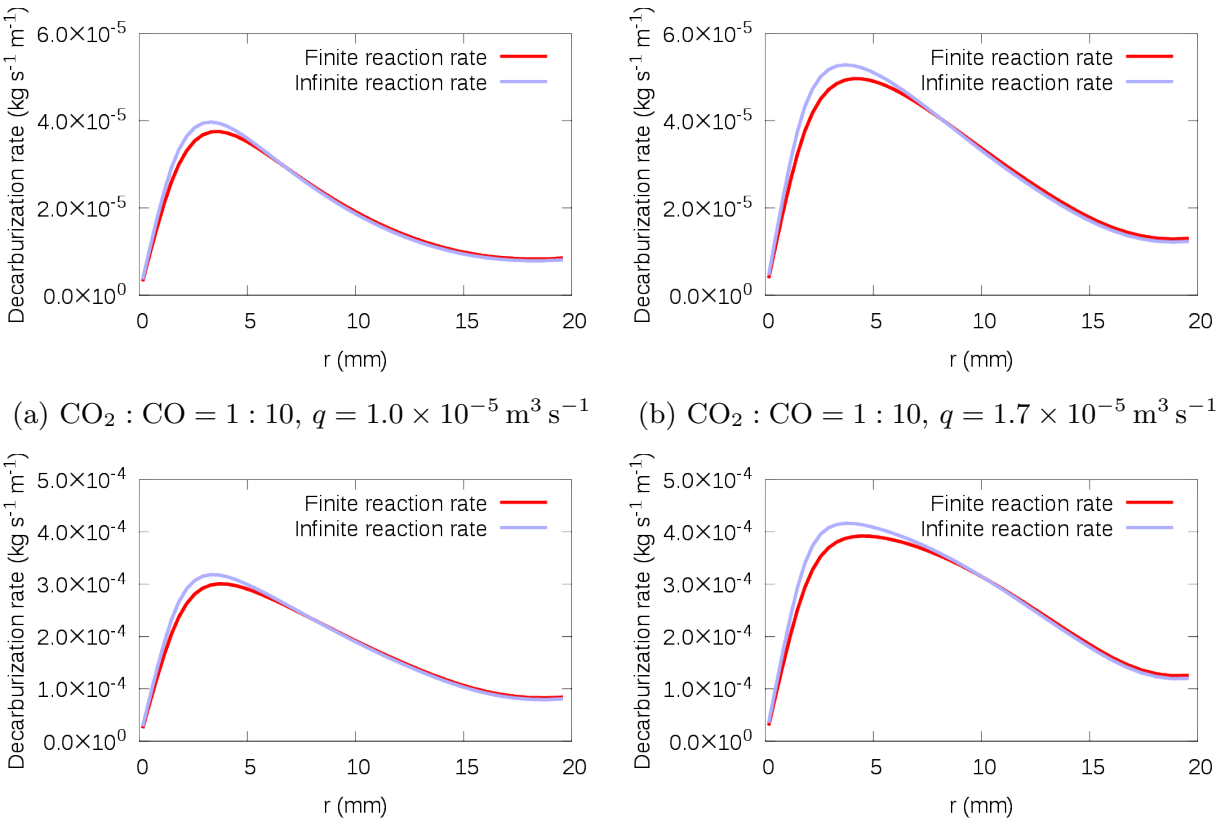
(a) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

(b) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

(c) Pure CO_2, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

(d) Pure CO_2, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

図 4.7: Radial profiles of reaction rates per unit area of CO_2, CO, and C on the gas–liquid interface; the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm



(a) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

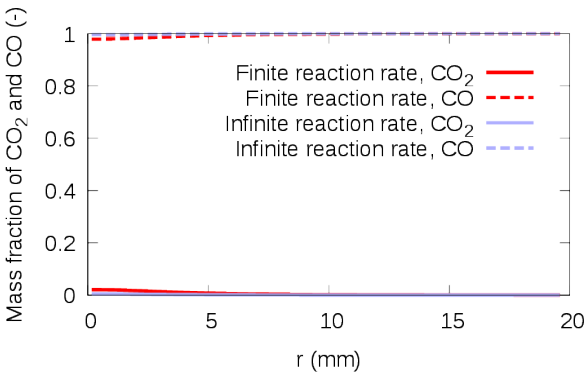
(b) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

(c) Pure CO_2, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

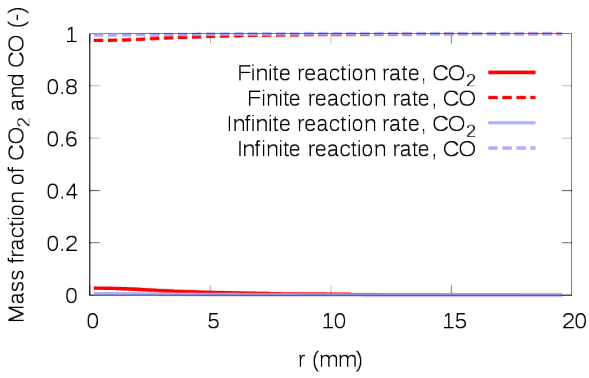
(d) Pure CO_2, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

図 4.8: Radial profiles of decarburization rate per unit radial length on the gas–liquid interface; the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm

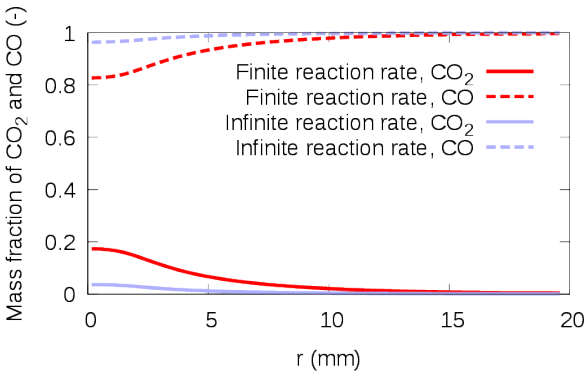
図 4.9 に，$t = 10\,\mathrm{s}$ における気液界面を含むセル中の CO_2 と CO の質量分率の半径方向の分布を示す．条件に依存して，各濃度は変化するが，分布の形状には大きな違いが見られない．図 4.7，4.8 で見たように，ジェットの衝突領域の近くでは，有限反応速度を用いると反応速度が減少するため，有限反応速度を用いたモデルの CO_2 の質量分率は無限反応速度を用いたモデルによって計算された値よりも大きい．図 4.10 に，$t = 10\,\mathrm{s}$ での坩堝の中心軸における CO_2 と CO の質量分率の垂直方向の分布を示す．界面反応速度モデル間の違いは，図 4.9 での違いと同じである．ガス流量が増加すると，境界層の厚みが減少している．ガスジェット中の CO_2 と CO の比が 1 : 10 の条件において，ガス流量が $1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$ の時の境界層厚みは，0.625 mm であり，ガス流量が $1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$ の時の 1/1.2 倍になっている．つまり，境界層厚みの減少率は，ガス流量の増加率よりも小さい．この結果は，図 4.5 において，高流量となるにつれ，反応効率が減少することに対応している．



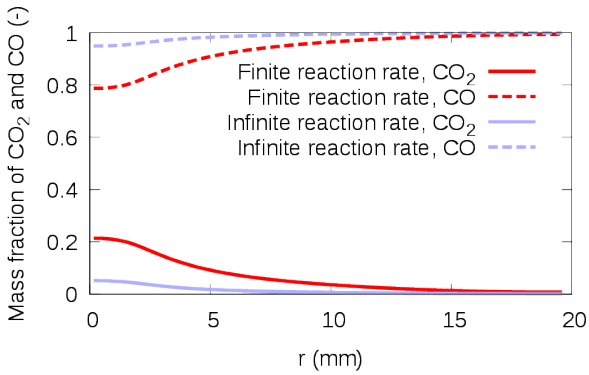
(a) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$



(b) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

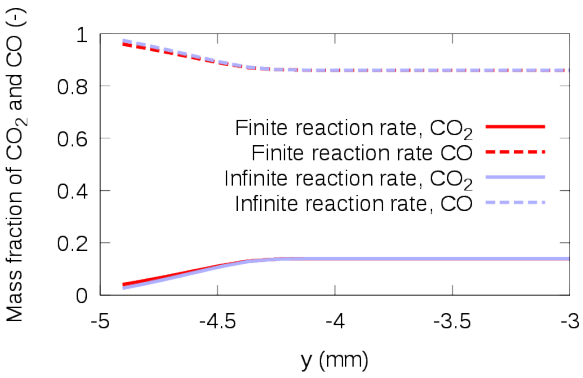


(c) Pure CO_2, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

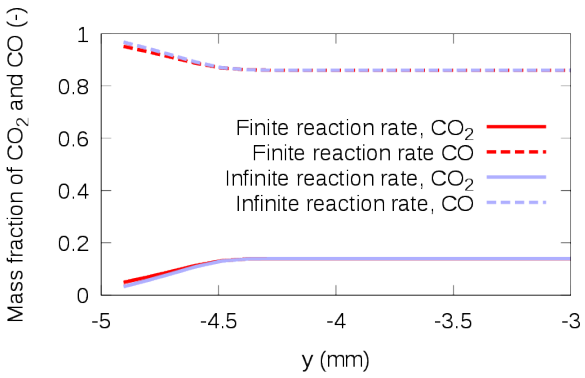


(d) Pure CO_2, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

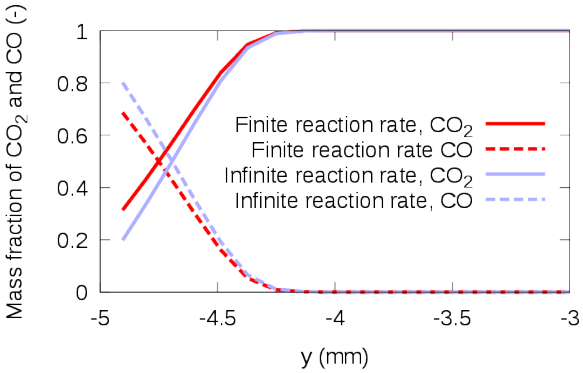
図 4.9: Radial profiles of mass fractions of CO_2 and CO on the gas–liquid interface; the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm



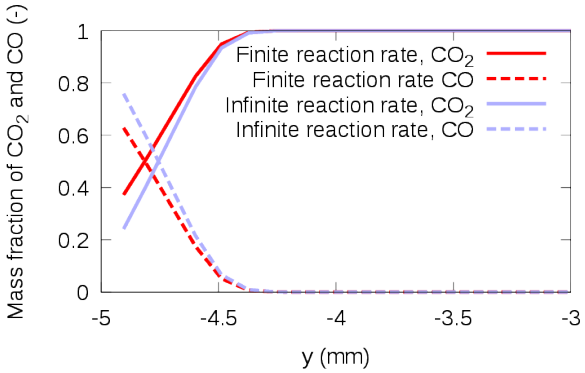
(a) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$



(b) $CO_2 : CO = 1 : 10$, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$



(c) Pure CO_2, $q = 1.0 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$



(d) Pure CO_2, $q = 1.7 \times 10^{-5}\,\mathrm{m^3\,s^{-1}}$

図 4.10: Vertical profiles of mass fractions of CO_2 and CO on the central axis of the crucible; the inner diameter of the nozzle was 4.0 mm

4.3　まとめ

本研究で提案した脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算に関する妥当性を評価するため，Nomura and Mori によって坩堝内で実施された CO_2 ガスジェットを用いた溶鉄の脱炭実験 [3] を計算し，坩堝全体の脱炭速度を測定された文献値と比較した結果を以下にまとめる．

- 各化学種の質量保存性誤差は，流入総質量の 0.5% 以内に収まっており，無視可能である．
- 坩堝全体の脱炭速度に関する吹付け CO_2–CO 混合ガス流量依存性および吹き付けガス中の CO_2 濃度依存性を精度良く再現することができた．
- 吹き付けガスの流量，CO_2 濃度を変えた計算結果から，流動–反応の相互作用によって，坩堝内の現象が変化することがわかった．
- 脱炭反応モデルにおいて，CO_2 の解離吸着反応の速度を有限とした場合と無限とした場合を比較すると，坩堝全体の脱炭速度は両者で変わらなかったが，局所的な脱炭速度には差異が見られた．

以上より，第 2 章で提案した脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算に関する妥当性が確認された．そして，これらの結果より，CO_2 の解離吸着反応速度は，CO_2 ガスジェットによる局所的な脱炭現象の再現において重要となることが示唆される．このことは，本章で扱った気液界面が平坦な場合においては，問題にならなかったが，気液界面が複雑に変形する場合に問題となることが予想される．したがって，第 5 章で議論する小型試験転炉に対する脱炭のシミュレーションにおいては，CO_2 の解離吸着反応速度を有限としたモデルを用いる．

第 5 章

小型試験転炉における脱炭のシミュレーション

本章では，第 2 章で述べた計算法を用いて，実機の 1/5 スケールの小型試験転炉における超音速 O_2 ジェットによる脱炭を計算し，スラグが無い状態での高炭素濃度の溶鉄浴に対する火点での脱炭現象の予測を試みる．本検討での目的は，転炉の脱炭速度を精度良く予想し，工業的に利用することではなく，不明点の多い脱炭現象の一部を解明することである．脱炭反応モデルにおいて，物質伝達係数を求めるための eddy cell モデルを RANS モデルの一つである k-ω SST モデルと共に用いる．第 3 章で述べたように，k-ω SST モデルを適用した場合，高速ガスジェットと溶鉄浴との流動の相互作用の評価に誤差が生じる．ここでは，この誤差を前提としたうえで，脱炭反応モデルを用いて，これまでに研究例のない超音速 O_2 ジェットによる脱炭に対する流動–反応の連成シミュレーションを実施し，実現象の再現性について考察する．

冷間実験 [20] および熱間実験 [21, 22, 23] で，超音速ガスジェットを溶鉄浴に衝突させると，0.1–10 mm のオーダの微細なスプラッシュ液滴が発生することがわかっているが，VOF 法に基づく本計算法では，微細なスプラッシュ液滴の再現は現実的ではない．したがって，超音速ガスジェットによって生成される微細なスプラッシュ液滴による脱炭については，本シミュレーションの対象外とした．

5.1 計算条件

日本製鉄が所有する小型試験転炉を想定して，超音速 O_2 ジェットを用いた脱炭をシミュレートした．小型試験転炉の形状，寸法を図 5.1a に示す．炉の大きさは実転炉の約 1/5 である．シミュレーションでは，内径 13.6 mm のノズルから 2000 kg の溶鉄浴へ純 O_2 ガスを吹き付けた．O_2 ジェットの質量流量は 0.19 kg s^{-1} であり，ノズル出口で超音速となる．溶鉄浴の初期温度は 1477 K，初期炭素濃度は 3.76 mass% とし，スラグは無いとした．溶鉄浴表面から 350 mm 上方に，ノズルの先端に設けられたガス噴出孔が位置するように，炉の中心軸上にノズルを設置した．炉底に設置された直径 3.5 mm の 4 つの底吹き羽口から Ar ガスを吹

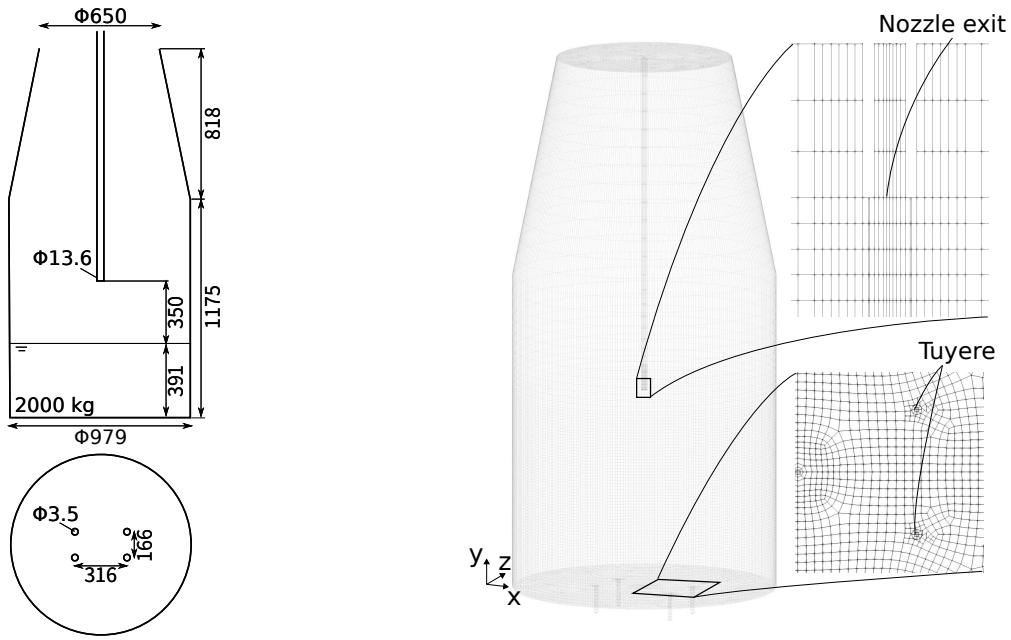
き込むことにより，溶鉄浴を攪拌した．Ar ガスの質量流量は $0.0059\,\mathrm{kg\,s^{-1}}$ とした．炉は高さ 1993 mm であり，内径は炉底で 979 mm，炉口で 650 mm である．これら計算条件を図 5.1c にまとめる．上吹きと底吹きの影響を明確にするため，底吹きは行わず上吹きのみ行った条件（上吹き条件）と底吹きと上吹きを同時に行った条件（上底吹き条件）の計算を実施した．上吹きジェットのレイノルズ数は 10^7 のオーダであるため，流れは乱流であるとし，乱流モデルには k-ω SST モデル [104] を用いた．

図 5.1b に示すように，格子は三次元とし，上吹きノズル先端のガス噴出孔，底吹き羽口，溶鉄浴面の近傍で格子サイズが小さくなる非構造格子とした．格子数は，647,508 である．

境界条件は次のように与えた．上吹きノズルと底吹き羽口の流入境界では，液相のカラー関数，質量流量，温度，化学種の質量分率，乱流運動エネルギー，比散逸率を規定し，圧力は境界に隣接する格子の値から外挿した．液相のカラー関数はゼロとし，質量流量は，上吹きノズルに対して，$0.19\,\mathrm{k\,s^{-1}}$，底吹き羽口に対して $0.0059\,\mathrm{kg\,s^{-1}}$ と設定し，両境界における温度は 300 K とした．化学種の質量分率については，上吹きノズルに対して，O_2 の質量分率を 1，底吹き羽口に対して，Ar の質量分率を 1 とし，他の化学種の質量分率は，両境界において全てゼロとした．乱流運動エネルギーは乱流強度を 5% として与えた．比散逸率は混合長をノズル径の 1/10 として与えた．上部境界は，自由流入出境界とし，液相のカラー関数，速度，温度，化学種の質量分率，乱流運動エネルギー，比散逸率の境界面に垂直な方向の勾配をゼロとし，全圧を 101325 Pa で規定した．壁と炉底境界では，速度をゼロとし，断熱とした．ただし，運動量保存式を計算する際には壁関数 [98] で計算される応力を課した．液相のカラー関数，化学種の質量分率，乱流運動エネルギーについては，境界面に垂直な方向の勾配をゼロとした．比散逸率には壁関数 [105] を適用した．

初期条件として，炉内の溶鉄質量が 2000 kg となるように液相のカラー関数を設定し，計算領域全体で速度をゼロ，温度を 1477 K とした．圧力は，気相では 101325 Pa，液相では溶鉄の静圧分布を与えた．気相は空気とし，化学種の質量分率を，$Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{O_2}} = 0.23$，$Y_{\mathrm{g}}^{\mathrm{N_2}} = 0.77$ とした．溶鉄中の炭素の質量分率は 3.76% とした．

カラー関数の輸送方程式を除く全ての方程式の空間離散化において，移流項には Sweby 制限関数 [114] による TVD スキーム，拡散項には，二次精度中心差分法を用いた．時間刻みは，設定した最大クーラン数から式 (3.1) で決められる．本計算では，最大クーラン数は 0.5 とした．



(a) Schematic　　(b) Computational grid

Distance from lance exit to bath surface (mm)	350
Specification of lance	Single hole ϕ13.6
Flow rate of top-blowing oxygen (m^3/s in STP)	0.133
Number of bottom-blowing tuyeres (—)	4
Specification of tuyeres	Single pipe ϕ3.5
Flow rate of bottom-blowing argon (m^3/s/hole in STP)	0.00333
Weight of molten iron (kg)	2000
Initial temperature (K)	1477
Initial mass fraction of carbon (%)	3.76

(c) Details of conditions

図 5.1: Simulation conditions for experimental basic oxygen furnace in Nippon Steel

5.2　結果と考察

図 5.2 に，上吹き条件および上底吹き条件での炉全体の脱炭速度の時間推移を示す．炉全体の脱炭速度は，$-\mathcal{R}^{\mathrm{C}}_{\mathrm{l,\,l\text{–}g}}V$ を全セルに渡って足し合わせて求めた．上吹き条件において，最初の 0.3 s の間に，脱炭速度が大きく変化している．これは，浴面にジェットが衝突し，キャビティが形成される非定常な現象が生じるためである．$t = 0.3\,\mathrm{s}$ 以降は，キャビティ表面（火点）が安定し，定常状態となるため，脱炭速度は $0.015\,\mathrm{kg\,s^{-1}}$ でほぼ一定になっている．吹き込まれた O_2 が全て $O_2 + 2\,C{=}2\,CO$ の脱炭反応により消費されると，脱炭速度は $0.19 \times 2W^{\mathrm{C}}_{\mathrm{l}}/W^{\mathrm{O_2}}_{\mathrm{g}} = 0.15\,\mathrm{kg\,s^{-1}}$ となる．上吹き条件では，吹き込まれた O_2 の約 10% が $O_2 + 2\,C{=}2\,CO$ の脱炭反応により消費されたとみなすことができる．一方，上底吹き条件の脱炭速度は，最初の 0.8 s 間は上吹き条件と同じ傾向を示すが，0.8–1.2 s において，急激に増加している．これは，底吹きによる気泡が $t = 0.8\,\mathrm{s}$ において浴面に到達して破裂し，複雑な気液界面が形成されて気液界面面積が増加するためである．$t = 1.2\,\mathrm{s}$ 以降の脱炭速度は，周期的

に変動しており，底吹きによる気泡の破裂が周期的に生じることと対応している．脱炭速度が非常に大きな値となっている瞬間があるが，これは VOF 法における数値的な問題に起因する現象である．後述するように，上底吹き条件では，底吹きにより溶鉄の飛散（スプラッシュ）が発生する．発生したスプラッシュ液滴の中には，本来，VOF 法では扱うことができない格子サイズ以下の液滴が存在することがある．そして，この液滴が上吹きジェットの気流に乗って火点に叩きつけられる場合がある．この時，火点の圧力が局所的に非常に高い値になり，O_2 分圧が急上昇し，瞬間的に脱炭速度が非常に大きな値となる．したがって，脱炭速度の瞬間的な高い値は数値計算法の問題に起因するものであり，物理的な意味は無いと考えられる．脱炭速度が周期的に変動している $t = 5$–$10\,\mathrm{s}$ のデータから上底吹き条件の時間平均脱炭速度を計算すると，$0.04\,\mathrm{kg\,s^{-1}}$ となり，吹き込まれた O_2 の約 30% が $O_2 + 2\,C{=}2\,CO$ の脱炭反応により消費されたとみなすことができる．

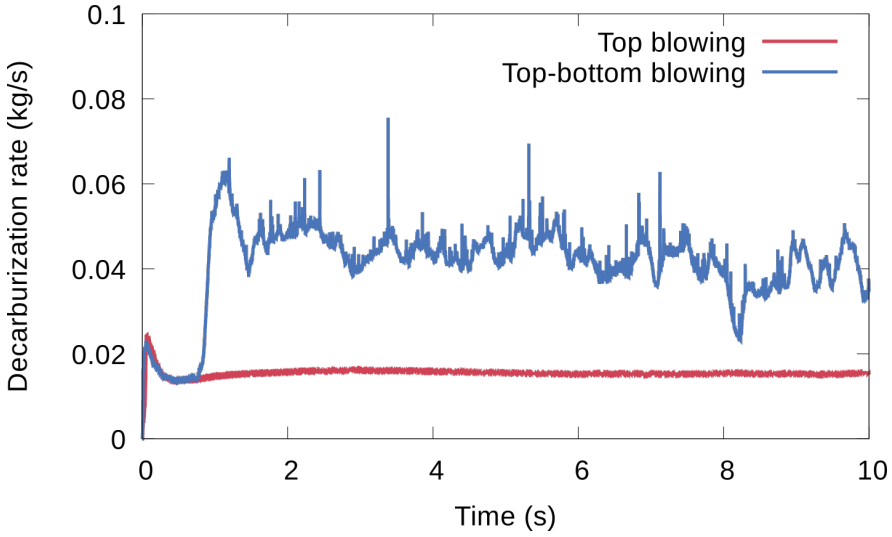
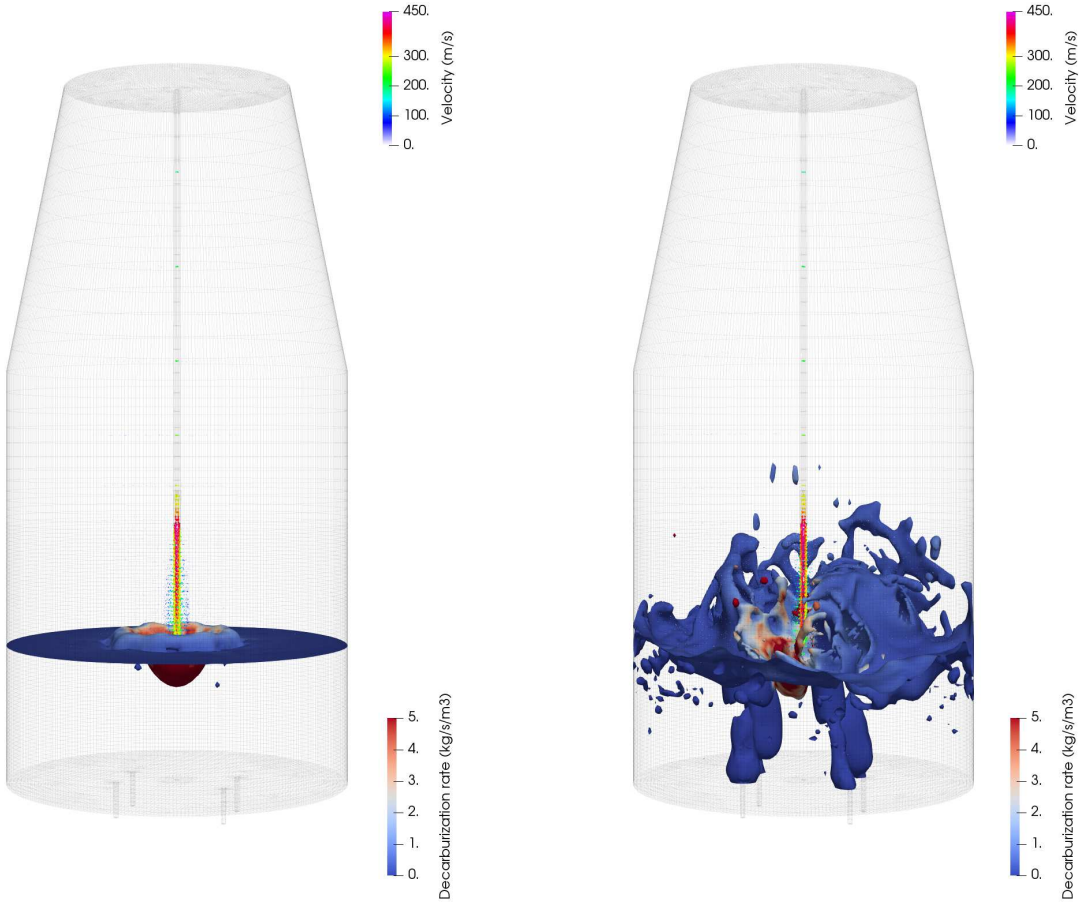


図 5.2: Time transition of decarburization rates in top and top–bottom blowing conditions

図 5.3 に，上吹き条件および上底吹き条件における $t = 10\,\mathrm{s}$ での瞬時のジェットの速度と界面における局所的な脱炭速度の分布を示す．最大速度 $450\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ の超音速 O_2 ガスジェットが溶鉄浴に衝突し，キャビティを形成している．上吹き条件では，キャビティが安定して形成されている．上吹き条件における初期の浴面位置からキャビティの底までの距離（キャビティ深さ）は，123.5 mm である．水モデル実験データを用いて求められた上野らによる経験式 [6]（付録 D 参照）でキャビティ深さを計算すると，158.9 mm となり，シミュレーション結果は経験式の結果よりも約 20% 小さい．第 3.2.4 節での水浴に衝突する高速ジェットの計算においても，k-ω SST モデルを用いるとキャビティ深さを約 25% 過小評価する結果が得られているため，これは乱流モデルに起因する誤差だと考えられる．したがって，本シミュレーションで得られたキャビティは実際よりも浅い可能性がある．局所的な脱炭速度は火点でもっとも高い．上吹き条件では，浴面は滑らかである．キャビティの縁に浴面の盛り上がりが見られるが，スプラッシュは見られない．一方，上底吹き条件では，浴面の複雑な変形の他，スプラッシュの発生が見られ，界面面積が大きい．底吹きによる界面面積の増加は，水モデル実

験 [115, 116] によっても示されている．本結果から界面面積を求めると，上吹き条件の場合 $0.87\,\mathrm{m}^2$，上底吹き条件の場合 $2.87\,\mathrm{m}^2$ となる．各条件の界面面積は，それぞれ静止した状態での浴面面積 $0.75\,\mathrm{m}^2$ の約 1.2 倍，3.8 倍である．上底吹き条件の界面面積は，上吹き条件の約 3.2 倍であり，この界面面積の増加により，上吹き条件に対して，脱炭速度が約 3 倍になったと考えられる．上吹き条件，上底吹き条件での酸素消費量から各反応サイトでの酸素消費量の内訳を求めると，火点での $O_2 + 2\,C{=}2\,CO$ の脱炭反応により，吹き込んだ O_2 の約 10% が消費され，底吹きによって変形した浴面およびスプラッシュ液滴での $O_2 + 2\,C{=}2\,CO$ の脱炭反応により，更に約 20% の O_2 が消費されたと考えられる．

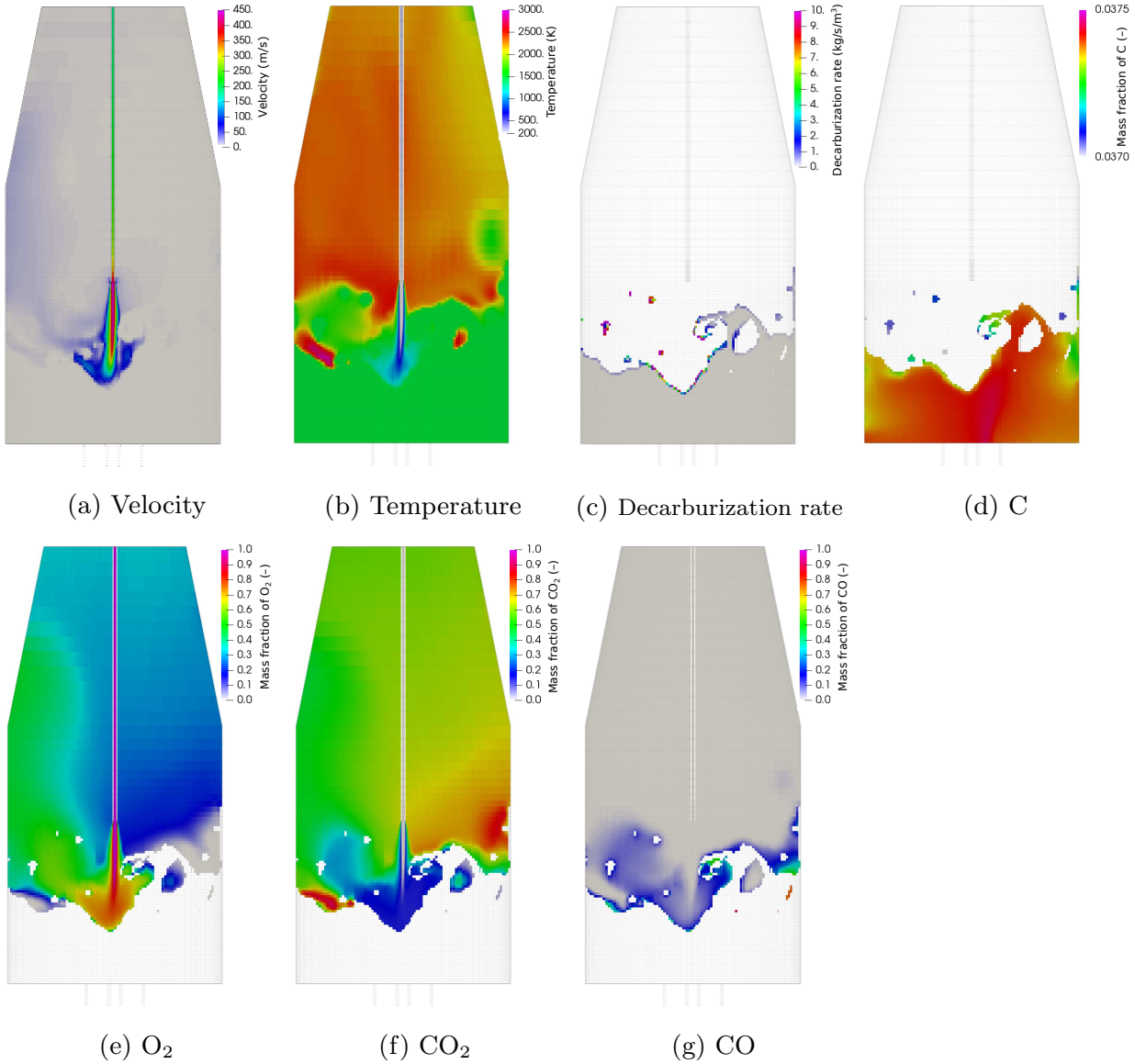


(a) top blowing condition　　(b) top-bottom blowing condition

図 5.3: Instantaneous distributions of velocity of jet and local decarburization rate on gas–liquid interface at $t = 10\,\mathrm{s}$

図 5.4 に，$t = 10\,\mathrm{s}$ での上底吹き条件における炉の中央断面の瞬時の速度，温度，脱炭速度，C，O_2，CO_2，CO の質量分率の分布を示す．上底吹きによって複雑に変形した気液界面において，脱炭反応により CO が発生している．また，底吹きによって生成されたスプラッシュ液滴表面においても脱炭反応によって CO が発生している．スプラッシュ液滴は，比表面積が大きいため，脱炭の進行が速く，C の質量分率が小さい．スプラッシュ液滴の C の質量分率がバルクの溶鉄よりも低いことは，Koch らによる 50 kg の溶鉄への O_2 の吹き付け実験 [22] で

も確認されている．本シミューレーションでは，$O_2 + 2\,C{=}2\,CO$ の脱炭反応により消費される O_2 は吹き込んだ O_2 の 30% 程度であるため，発生した CO よりも消費されずに残った O_2 の方が多い．したがって，CO は O_2 との二次燃焼反応によって消費され，全て CO_2 となっている．



(a) Velocity　(b) Temperature　(c) Decarburization rate　(d) C

(e) O_2　(f) CO_2　(g) CO

図 5.4: Instantaneous distributions of velocity, temperature, decarburization rate, and mass fractions of C, O_2, CO_2, CO at $t = 10\,\mathrm{s}$

一般的に，実転炉では，$O_2 + 2\,C = 2\,CO$ の脱炭反応により，ほぼ 100% の O_2 が消費されると言われている [9]．一方，本シミュレーション結果では，上吹き条件，上底吹き条件の場合，それぞれ吹き込まれた O_2 の 10，30% 程度が $O_2 + 2\,C = 2\,CO$ の脱炭反応により消費された．この結果は，Dogan らによるプロセスシミュレーションモデルを用いたシミュレーション結果 [25, 28] と定性的に一致する．Dogan らは，文献 [25] において，滑らかな火点表面を仮定し，火点面積，物質伝達係数に関する経験式を用いたモデルにより，脱炭速度を推

定した．そして，吹き込まれた O_2 の約 40% が火点における脱炭反応によって消費される結果を得た．また，文献 [28] では，脱炭の他，脱 Si，Mn を考慮し，火点面積を経験式から計算される値の 50–100 倍とした時に初めて，実機の脱 Si 速度を再現できるという結果を得た．Dogan らの一連の研究において，各モデルによって，反応速度が変化し，定量的に統一的な結果が得られているわけではないが，火点での反応速度は小さく，火点における反応だけでは，転炉全体の反応速度を説明できないという点では一致している．本シミュレーションによる結果も，この点について，これらの既往研究と整合する．Dogan らは，Koch らによる 50 kg の溶鉄への O_2 吹き付け実験におけるスプラッシュ液滴の解析結果 [22] を参照し，実機では，O_2 ジェットによって生成された微細なスプラッシュ液滴によって反応界面積が増加するため，脱 Si 速度が大きくなると推測している．本シミュレーション結果からも，同様に，実機では，O_2 ジェットによって生成された微細なスプラッシュ液滴によって反応界面積が増加し，脱炭速度が増加することが示唆される．また，本シミュレーションでは解像できなかった浴面の微細な変形も界面面積の増加要因として考えられる．界面面積の違いにより，上底吹き条件の脱炭速度が上吹き条件の約 3 倍であることが概ね説明できたことから，実際は，上吹きジェットによって生成される微細なスプラッシュ液滴により界面面積が増加し，本シミュレーションの上底吹き条件の結果に対して，面積が約 3 倍になると推測される．しかしながら，微細なスプラッシュ液滴は，比表面積が大きく，脱炭の進行が非常に速いため，飛散中に完全に脱炭されてしまい，炉内に存在するスプラッシュ液滴の一部しか，脱炭速度の増加に寄与しない可能性がある．したがって，生成されるスプラッシュ液滴による界面面積の増加量は，本シミュレーションの上底吹き条件の結果の 3 倍より多くとも不自然ではない．これらの仮説を明らかにするためには，上吹きジェットによって生成される微細なスプラッシュ液滴を再現可能な計算法の開発が必要である．これは今後取り組むべき課題である．

5.3　まとめ

化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法および脱炭反応モデルを用いて，1/5 スケール小型試験転炉のシミュレーションを実施し，以下の結果を得た．

- 本計算法により，O_2，CO_2 による脱炭，二次燃焼，超音速ガスジェットによるキャビティの形成，底吹きによる攪拌といった転炉の主要な現象が定性的に再現された．
- 上吹きノズルから超音速で吹き込まれた O_2 の約 10% が, 火点における $O_2 + 2\,C = 2\,CO$ の脱炭反応により消費された．
- 底吹きによって複雑に変形した浴面と生成されたスプラッシュ液滴での $O_2 + 2\,C = 2\,CO$ の脱炭反応により，吹き込まれた O_2 の約 20% が消費された．
- 底吹きによって生成されたスプラッシュ液滴は，バルクの溶鉄に比べて，脱炭の進行が速かった．

以上より，本計算法を用いることで，これまでに研究例のない超音速 O_2 ジェットによる脱炭

に対する流動–反応の連成シミュレーションができることがわかった．また，火点での脱炭反応だけでは，転炉全体の反応速度を説明できないことが示唆された．このことは，プロセスシミュレーションモデルを用いた既往研究と整合する．そして，溶鉄，水を使った既往研究および本シミュレーション結果から，実転炉では，本シミュレーションでは捉えられなかった超音速ジェットによって生成される微細なスプラッシュ液滴および微細な構造を持つ浴面における脱炭が O_2 の大部分を消費している可能性が高いことが示唆された．

第 6 章

結言

転炉における火点での脱炭の解析を目的に，化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法および脱炭反応モデルを提案した．以下に本研究の成果をまとめる．

第 2 章では，転炉における脱炭現象を扱うための基礎となる数値計算法の詳細を述べた．Thermo CIP-CUP 法 [1, 2] に基づく圧縮性気液二相流の計算法を，化学反応による物質伝達を考慮できるように拡張すると共に，非保存形の移流項の離散化法を改良した．具体的には，従来，CIP 法などのセミラグランジュスキームで離散化される非保存形の移流項を保存形の移流項とその他の部分に分けて離散化した．これにより，移流項に対する離散化手法の選択の自由度を高めると共に，非構造格子へ適用できるように拡張し，実用問題に対して有用な手法とした．そして，野村と森らの脱炭反応モデル [3] を参考にして，物質伝達速度と界面反応速度を考慮した反応モデルを構築し，圧縮性気液二相流の計算法と統合した．これにより，従来の CFD を用いた脱炭計算 [4, 5] とは異なり，物質伝達速度と界面反応速度の両方を脱炭速度の律速過程として考慮できるようにし，転炉での超音速 O_2 ジェットを用いた脱炭の解析に適用可能な計算法とした．

第 3 章では，本計算法を用いて，圧縮性単相流，非圧縮性単相乱流，非圧縮性気液二相流の代表的な問題を解くことにより，流体計算の妥当性を評価した．その結果，本計算法について，以下の知見が得られた．

- 超音速および亜音速外部流れの一つである円弧状バンプを超える流れの計算において，質量保存誤差は，0.01–0.1% と小さく，保存形の質量保存式を用いる圧力ベースの解法とほぼ同じ結果が得られた．
- 非圧縮性単相乱流の一つである後ろ向きステップ流れの計算において，乱流モデルに LES モデルの一つである Vreman モデルを用いることで，ストリークや小さな渦などの乱流構造を捉えることが可能であり，速度の時間平均値と標準偏差については実験結果と良く一致する結果が得られた．
- 非圧縮性気液二相流の一つであるダム崩壊の計算において，従来の非圧縮性 VOF 法や MPS 法などの計算法と同等の精度で水柱の界面位置が再現された．
- 任意多面体格子からなる非構造格子を用いた計算においても，六面体格子を用いた時と

同様に，妥当な結果が得られた．

以上より，本計算法は，圧縮性流体，乱流，気液二相流に対応しており，幅広い流れを扱えるとわかった．これらの結果により，第 4 章で議論した脱炭反応モデルを評価するのに十分な計算法が確立されたと結論づけられた．

本章ではさらに，転炉に対する水モデル実験としてしばしば研究対象とされる水浴に衝突する高速ガスジェットを計算し，上野らによる測定結果 [6] と比較することにより，妥当な結果が得られるか確認した．その結果，以下の知見が得られた．

- RANS モデルの一つである k-ω SST モデルを用いると，時間平均的な現象を定性的に再現できた．しかしながら，定量的には，ジェットによって水面に形成されるキャビティの平均深さは約 25% 過小評価され，直径は約 10% 過大評価された．また，ジェットの非定常性を捉えられないため，キャビティ深さの非定常な形状変化を再現することは困難であった．
- LES モデルの一つである Vreman モデルを用いることで，時間平均的な現象を定性的に再現できるだけでなく，ジェットによって水面に形成されるキャビティの平均深さ，直径に加え，キャビティ深さの非定常な変化まで定量的に再現できた．

以上より，本計算法に RANS モデルを組み合わせると，水浴に衝突する高速ガスジェットの時間平均的な現象を定性的に再現でき，本計算法に LES モデルを組み合わせると，時間平均的な現象だけでなく，非定常な現象も定量的に再現できることが確認された．これらの結果より，転炉に対する計算においても，本計算法に，RANS モデル，LES モデルを組み合わせると，それぞれ水モデルでの結果と同様の傾向を持つ結果が得られることが示唆された．しかしながら，ここで扱った高速ガスジェットは亜音速であるのに対し，転炉では超音速ガスジェットが用いられるため，LES モデルを転炉に対する計算に適用することは困難である．LES モデルを超音速流れに適用するためには，衝撃波による不連続面での数値振動を抑制しつつ，乱流によって生じる小さな渦などの細かな構造を解像する必要があり，衝撃波捕獲法と呼ばれる手法を確立する必要がある [107, 108]．また，脱炭反応モデルで必要とされる物質伝達係数を計算するための eddy cell モデル [88] は RANS モデルと共に用いられてきており [72, 109, 110, 111, 112, 113]，LES モデルと共に用いた研究例はないため，サブグリッドスケールモデルとしての基礎的な検証を伴う開発が必要である．したがって，第 5 章で議論した小型試験転炉における脱炭のシミュレーションでは，RANS モデルを適用した場合の高速ガスジェットと溶鉄浴との流動の相互作用の評価における誤差を許容し，本計算法に RANS モデルを組み合わせて用いた．

第 4 章では，本計算法を用いて，坩堝内の溶鉄への CO_2–CO 混合ガスジェットの吹き付けによる脱炭 [3] を計算し，坩堝全体の脱炭速度を測定された文献値と比較することにより，脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算に関する妥当性を評価した．その結果，以下の知見が得られた．

- 各化学種の質量保存性誤差は，流入総質量の 0.5% 以内に収まっており，無視可能であった．
- 坩堝全体の脱炭速度に関する吹付け CO_2–CO 混合ガス流量依存性および吹き付けガス中の CO_2 濃度依存性を精度良く再現できた．
- 吹き付けガスの流量，CO_2 濃度を変えた計算結果から，流動–反応の相互作用によって，坩堝内の現象が変化することがわかった．
- 脱炭反応モデルにおいて，CO_2 の解離吸着反応の速度を有限とした場合と無限とした場合を比較すると，坩堝全体の脱炭速度は両者で変わらなかったが，局所的な脱炭速度には差異が見られた．

以上より，脱炭反応モデルおよび流動–反応の連成計算に関する妥当性が確認された．そして，これらの結果より，CO_2 の解離吸着反応速度は，CO_2 ガスジェットによる局所的な脱炭現象の再現において重要となることが示唆された．本章で扱った気液界面が平坦な場合においては，局所的な脱炭速度の再現性は全体の現象に大きな影響を与えなかったが，気液界面が複雑に変形する場合には全体の現象に無視できない影響を与えることが予想された．したがって，第 5 章で議論した小型試験転炉に対する脱炭のシミュレーションにおいては，CO_2 の解離吸着反応速度を有限としたモデルを用いた．

第 5 章では，本計算法を用いて，実機の 1/5 スケールの小型実験転炉における超音速 O_2 ジェットによる脱炭を計算し，スラグが無い状態での高炭素濃度の溶鉄浴に対する火点での脱炭の予測を試みた．その結果，以下の知見が得られた．

- 本計算法により，O_2，CO_2 による脱炭，二次燃焼，超音速ガスジェットによるキャビティの形成，底吹きによる攪拌といった転炉の主要な現象が定性的に再現された．
- 上吹きノズルから超音速で吹き込まれた O_2 の約 10% が, 火点における $O_2 + 2\,C = 2\,CO$ の脱炭反応により消費された．
- 底吹きによって複雑に変形した浴面と生成されたスプラッシュ液滴での $O_2 + 2\,C = 2\,CO$ の脱炭反応により，吹き込まれた O_2 の約 20% が消費された．
- 底吹きによって生成されたスプラッシュ液滴は，バルクの溶鉄に比べて，脱炭の進行が速かった．

以上より，本計算法を用いることで，これまでに研究例のない超音速 O_2 ジェットによる脱炭に対する流動–反応の連成シミュレーションができることがわかった．また，火点での脱炭反応だけでは，転炉全体の反応速度を説明できないことが示唆された．このことは，プロセスシミュレーションモデルを用いた既往研究と整合する．そして，溶鉄，水を使った既往研究および本シミュレーション結果から，実転炉では，本シミュレーションでは捉えられなかった超音速ジェットによって生成される微細なスプラッシュ液滴および微細な構造を持つ浴面における脱炭が O_2 の大部分を消費している可能性が高いことが示唆された．

本研究では，化学反応による物質伝達を伴う圧縮性気液二相流の計算法および脱炭反応モデルを開発・検証し，比較的，実験的な現象把握が進んでいる火点での現象に着目して，転炉内

の現象を推定した．その結果，本計算法を用いることで，O_2，CO_2 による脱炭，二次燃焼，超音速ガスジェットによるキャビティの形成，底吹きによる攪拌といった転炉の主要な現象を定性的に再現できることがわかった．また，火点での脱炭反応だけでは，転炉全体の反応速度を説明できないことが示唆され，プロセスシミュレーションモデルを用いた既往研究と整合した．本研究は，初めて，流動–反応を連成し，転炉内の脱炭現象を推定した取り組みであり，転炉内現象の全容解明へと繋がる一歩となる．

今後の展開としては，ジェットの非定常性を捉えることが可能な LES を用いた転炉の脱炭シミュレーションが考えられる．第 3 章で示したように LES を用いることによって水モデル実験におけるジェットおよびキャビティ形状の非定常な変化を定量的に捉えることができる．超音速 O_2 ガスジェットの非定常性を再現することで，ジェットによって生成される微細なスプラッシュ液滴が再現されれば，反応界面面積が増加し，転炉全体の脱炭速度を定量的に予測できる可能性がある．そのためにはまず，微細なスプラッシュ液滴が発生する系 [20] に対して，LES を用いて流動を計算し，スプラッシュ液滴の再現性を調査することが考えられる．微細なスプラッシュ液滴の生成を捉えるためには，適合細分化格子法 [117] が有用であり，生成された微細な液滴の追跡には，VOF 法で捉えることが出来ない格子サイズ以下の液滴を粒子に変換して追跡する方法 [118] が有用である．微細な液滴の生成が捉えられれば，微細な構造を持つ浴面も一定程度解像できると推測される．また，これに加えて，LES モデルを超音速流れに適用するための衝撃波捕獲法 [107, 108] の適用と評価が必要である．そして，脱炭反応速度を求める際に重要となる物質伝達係数に対するサブグリッドスケールモデルの開発と基礎的な検証も必要である．

最終的に，転炉内で生じる全ての現象を解明するためには，本研究で扱った火点での脱炭だけでなく，ジェットの衝突によって生成された粒鉄，スラグ，CO ガスからなるエマルジョンゾーンに対するモデルや Si，Mn，P などに対する溶鉄–スラグ間反応に対するモデルが必要とされる．そのためには，CFD による計算法の研究だけでなく，実験的な現象把握に関する研究にも取り組む必要があると考えられる．

付録

A　拡散項の離散化法

セル中心有限体積法では，拡散項はガウスの発散定理を用いて以下のように離散化される．

$$\nabla \cdot \Gamma \nabla \phi = \frac{1}{V} \sum_{\mathrm{f}} \Gamma_{\mathrm{f}} \boldsymbol{S}_{\mathrm{f}} \cdot (\nabla \phi)_{\mathrm{f}} \tag{A.1}$$

ここで，Γ_{f} はセル中心の値から線形補間して求める．式中の $\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}} \cdot (\nabla \phi)_{\mathrm{f}}$ は，以下のように over-relaxed 法 [119] によって離散化される．

$$\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}} \cdot (\nabla \phi)_{\mathrm{f}} = |\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}| \left[\frac{|\boldsymbol{d}|}{\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{n}_{\mathrm{f}}} \frac{\phi_{\mathrm{N}} - \phi_{\mathrm{P}}}{|\boldsymbol{d}|} + \left(\boldsymbol{n}_{\mathrm{f}} - \frac{\boldsymbol{d}}{\boldsymbol{d} \cdot \boldsymbol{n}_{\mathrm{f}}} \right) \cdot (\nabla \phi)_{\mathrm{f}} \right] \tag{A.2}$$

ここで，図 A.1 に示すように，着目セルのセル中心点 P，隣接セルのセル中心点 N，P から N へ向かうベクトル $\boldsymbol{d}$，隣接面の面ベクトル $\boldsymbol{S}_{\mathrm{f}}$，隣接面の単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}_{\mathrm{f}}$ である．第 1 項がセル面に直交な成分，第 2 項がセル面に非直交な成分であり，$\boldsymbol{d}$ が面に垂直な場合，第 2 項はゼロとなる．第 2 項の $(\nabla \phi)_{\mathrm{f}}$ はセル中心点 P, N における勾配を用いて線形補間して求める．セル中心点における勾配はガウスの発散定理を用いて下記のように計算される．

$$\nabla \phi = \frac{1}{V} \sum_{\mathrm{f}} \boldsymbol{S}_{\mathrm{f}} \phi_{\mathrm{f}} \tag{A.3}$$

ここで，ϕ_{f} はセル中心点 P, N における値から線形補間して求められる．

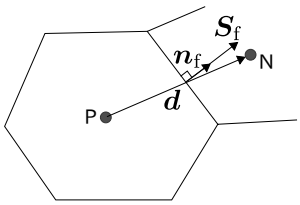


図 A.1: over-relaxed 法における点とベクトルの配置

B Eddy cell モデル

Lamont and Scott による eddy cell モデル [88] は気液二相流における物質伝達係数モデルであり, 本研究のように, RANS モデルと組み合わせて用いられる [72, 109, 110, 111, 112, 113]. 表面更新説に基づくと，拡散係数 D，表面更新頻度 $1/\tau$ を用いて，物質伝達係数 k は $k \propto (D/\tau)^{1/2}$ と表すことができる．eddy cell モデルでは，表面更新頻度として，コルモゴロフの時間スケールの逆数が用いられ，$1/\tau = (\nu/\epsilon)^{-1/2}$ とモデル化される．ここで，動粘性係数 ν，乱流エネルギー散逸率 ϵ である．したがって，物質伝達係数はモデル係数 C_s を用いて $k = C_\mathrm{s} D^{1/2}(\epsilon/\nu)^{1/4}$ で計算される．

C Vreman モデル

LES のサブグリッドモデルの一つである Vreman モデル [99, 100] は壁近傍での乱流の非等方性を考慮でき，層流を含む流れや圧縮性流れに適用できる代数モデルである．Vreman モデルでは，乱流粘性係数 μ_t は以下のように表される．

$$\mu_\mathrm{t} = \rho c \Delta^2 \sqrt{Z/(\alpha_{ij}\alpha_{ij})} \tag{C.4}$$

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \tag{C.5}$$

$$Z = \beta_{11}\beta_{22} + \beta_{22}\beta_{33} + \beta_{33}\beta_{11} - \beta_{12}^2 - \beta_{23}^2 - \beta_{31}^2 + (c_\mathrm{c}\nabla\cdot\boldsymbol{U})^4/c^2 \tag{C.6}$$

$$\beta_{ij} = \alpha_{ki}\alpha_{kj} \tag{C.7}$$

ここで，c，c_c はモデル定数である．本研究では，[100] での推奨値 $c = 0.07$，$c_\mathrm{c} = 0.1$ を用いた．乱流熱伝導率 λ_t は $\lambda_\mathrm{t} = C_\mathrm{p}\mu_\mathrm{t}/\mathrm{Pr_t}$ で計算した．乱流プラントル数 $\mathrm{Pr_t}$ は $\mathrm{Pr_t} = 1.0$ とした．

D ジェットによって浴面に形成されるキャビティ深さに対する経験式

転炉の火点形状の推定を目的に，水，グリセリン，水銀などを用いた冷間試験 [16, 17, 18, 19, 20, 6] によって，ジェットの吹付け条件とキャビティ形状との関係が調べられている．キャビティ深さに対する経験式は，キャビティの底において，ジェットによる圧力と液相の静圧が釣り合うとした下記の式によって整理され，実験結果に一致するようにパラメータ C が決められている．

$$\frac{1}{2}\rho_\mathrm{g} u_\mathrm{cavity}^2 = \rho_\mathrm{l} g L \tag{D.8}$$

$$u_\mathrm{cavity} = C\frac{d}{L+h}u_\mathrm{e} \tag{D.9}$$

ここで，気相密度 $\rho_{\mathrm{g}}\,(\mathrm{kg\,m^{-3}})$，ノズル出口での速度 $u_{\mathrm{e}}\,(\mathrm{m\,s^{-1}})$，ノズル出口径 $d\,(\mathrm{m})$，ノズル出口と浴面の間の距離 $h\,(\mathrm{m})$，重力加速度 $g\,(\mathrm{m\,s^{-2}})$，キャビティ深さ $L\,(\mathrm{m})$ である．上野らは，この式を変形し，質量流量 $\dot{m}\,(\mathrm{kg\,s^{-1}})$ と等エントロピー変化を仮定したノズル出口速度の理論式を用いて，下記のように，式 (D.8) を評価している．

$$\frac{1}{2}\rho_{\mathrm{g}}u_{\mathrm{e}}^2\left(C\frac{d}{L+h}\right)^2=\rho_{\mathrm{l}}gL \tag{D.10}$$

$$\rho_{\mathrm{g}}u_{\mathrm{e}}^2=\dot{m}u_{\mathrm{e,\,ideal}} \tag{D.11}$$

$$u_{\mathrm{e,\,ideal}}=\sqrt{\frac{2\gamma}{\gamma-1}R_{\mathrm{g}}T_{\mathrm{o}}\left(1-\frac{p_{\mathrm{a}}}{p_{\mathrm{o}}}\right)} \tag{D.12}$$

ここで, 比熱比 $\gamma=1.4$, 混合ガスの気体定数 $R_{\mathrm{g}}\,(\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}})$, 淀み点温度 $T_{\mathrm{o}}\,(\mathrm{K})$, 淀み点圧力 $p_{\mathrm{o}}\,(\mathrm{Pa})$，雰囲気圧力 $p_{\mathrm{a}}\,(\mathrm{Pa})$ である．淀み点温度 T_{o}，淀み点圧力 p_{o} は，実験では直接測定され，シミュレーションでは，流入境界の温度 $T_{\mathrm{inlet}}\,(\mathrm{K})$，圧力 $p_{\mathrm{inlet}}\,(\mathrm{Pa})$，速度 $u_{\mathrm{inlet}}\,(\mathrm{m\,s^{-1}})$ から，等エントロピー流れを仮定した理論式 [120] を用いて，以下の式で計算される．

$$p_{\mathrm{o}}=p_{\mathrm{inlet}}\left(1+\frac{\gamma-1}{2}M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \tag{D.13}$$

$$T_{\mathrm{o}}=T_{\mathrm{inlet}}\left(1+\frac{\gamma-1}{2}M^2\right) \tag{D.14}$$

$$\tag{D.15}$$

ここで，マッハ数 $M=u_{\mathrm{inlet}}/a$，音速 $a=\sqrt{\gamma R_{\mathrm{g}}T_{\mathrm{inlet}}}\,(\mathrm{m\,s^{-1}})$ である．パラメータ C はジェット速度の減衰係数であり，表 D.1 に示すように，その値は実験間でばらつきがある．また，自由ジェットの測定によれば，$C=6.0$ とされている [121].

表 D.1: ジェット速度の減衰係数

上野ら [6]	Cheslak ら [17]	瀬川（水）[122]	田中ら [123]	Banks ら [16]	瀬川（溶鉄）[122]
5.6	6.4	6.5	7.6	7.9	14.1

参考文献

[1] 姫野武洋, 渡辺紀徳. 低重力環境における熱流体管理に関する研究（第 2 報，界面張力に駆動される流れの観察と数値解析）. 日本機械学会論文集 B, Vol. 69, pp. 2400–2407, 2003.

[2] 姫野武洋, 熊谷剛彦. 減圧環境における上昇気泡の数値解析. 鉄と鋼, Vol. 101, pp. 109–116, 2015.

[3] H. Nomura and K. Mori. Kinetics of decarburization of liquid iron with high concentration of carbon. *Transactions ISIJ*, Vol. 13, pp. 265–273, 1973.

[4] H. Cho, S. Jung, S. Kim, H. Lee, and Y. Kang. Decarburization of molten Fe–C droplet: Numerical simulation and experimental validation. *ISIJ International*, Vol. 54, pp. 2559–2568, 2014.

[5] L. Gao, Z. Shi, Y. Yang, D. Li, G. Zhang, A. Mclean, and K. Chattopadhyay. Mathematical modeling of decarburization in levitated Fe-Cr-C droplets. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 49B, pp. 1985–1994, 2018.

[6] 上野和之, 髙谷幸司, 石井俊夫, 嶋崎真一, 中村修, 駒形大輔, 安藤誠, 浅原紀史, 景山正人. 水モデル実験による上吹きジェットにより形成された液面キャビティの動的挙動. 鉄と鋼, Vol. 101, pp. 74–81, 2015.

[7] worldsteel association. https://www.worldsteel.org, Accessed on Jul. 4th, 2021.

[8] 日本鉄鋼協会, 日本鉄鋼協会第 5 版鉄鋼便覧委員会. 鉄鋼便覧. 日本鉄鋼協会, 第 5 版, 2014.

[9] R. Fruehan. *The Making, Shaping and Treating of Steel.* The AISE Steel Foundation, 1998.

[10] Y. Lee and L. Lolbeinsen. An analysis of hot spot phenomenon in BOF process. *ISIJ International*, Vol. 47, pp. 764–765, 2007.

[11] D. Glass and P. Hays. The performance of supersonic nozzles as used in the oxygen conversion process. Technical report, University of Michigan, 1963. ORA Report 04806 1-F.

[12] S. Sharma, J. Hlinka, and D. Kern. The bath circulation, jet penetration and high-temperature reaction zone in BOF steelmaking. In *NOH-BOSC Proceedings*, Vol. 60, pp. 181–197, 1977.

[13] S. Koria and K. Lange. Penetability of impinging gas jets in molten steel bath. *Steel*

Research, Vol. 58, pp. 421–426, 1987.

[14] H. Meyer, W. Porter, G. Smith, and J. Szekely. Slag-metal emulsions and their importance in BOF steelmaking. *Journal of Metals*, Vol. 20, pp. 35–42, 1968.

[15] M. Millman, A. Overbosch, A. Kapilashrami, D. Malmberg, and M. Brämming. Study of refining performance in BOS converter. *Ironmaking Steelmaking*, Vol. 38, pp. 499–509, 2011.

[16] R. Banks and D. Chandrasekhara. Experimental investigation of the penetration of a high-velocity gas jet through a liquid surface. *Journal Fluid Mechanics*, Vol. 15, pp. 13–34, 1963.

[17] F. Cheslak, J. Nicholls, and M. Sichel. Cavities formed on liquid surfaces by impinging gaseous jets. *Journal Fluid Mechanics*, Vol. 36, pp. 55–63, 1969.

[18] F. Qian, R. Mutharasan, and B. Farouk. Studies of interface deformations in single- and multi-layered liquid baths due to an impinging gas jet. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 27B, pp. 911–920, 1996.

[19] M. Li, Q. Li, S. Kuang, and Z. Zou. Determination of cavity dimensions induced by impingement of gas jets onto a liquid bath. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 47B, pp. 116–126, 2016.

[20] S. Sabah and G. Brooks. Splashing in oxygen steelmaking. *ISIJ International*, Vol. 54, pp. 836–844, 2014.

[21] S. Koria and K. Lange. A new approach to investigate the drop size distribution in basic oxygen steelmaking. *Metallurgical Transactions B*, Vol. 15B, pp. 109–116, 1984.

[22] K. Koch and J. Falkus. Hot model experiments of the metal bath spraying effect during the decarburization of fe-c melts through oxygen top blowing. *Steel Research International*, Vol. 64, pp. 15–21, 1993.

[23] Subagyo, G. Brooks, K. Coley, and G. Irons. Generation of droplets in slag–metal emulsions through top gas blowing. *ISIJ International*, Vol. 43, pp. 983–989, 2003.

[24] 橋本健治. 反応工学. 培風館, 1993.

[25] N. Dogan, G. Brooks, and M. Rhamdhani. Comprehensive model of oxygen steelmaking part 3: Decarburization in impact zone. *ISIJ International*, Vol. 51, pp. 1102–1109, 2011.

[26] R. Sarkar, P. Gupta, S. Basu, and N. Ballal. Dynamic modeling of LD converter steelmaking: Reaction modeling using Gibbs' free energy minimization. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 46B, pp. 961–976, 2015.

[27] B. Rout, G. Brooks, Z. Li, and A. Rhamdhani. Dynamic model of basic oxygen steelmaking process based on multi-zone reaction kinetics: Model derivation and validation. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 49B, pp. 537–557, 2018.

[28] A. Kadrolkar and N. Dogan. Model development for refining rates in oxygen steelmaking: Impact and slag–metal bulk zones. *Metals*, Vol. 9, p. 309, 2019.

[29] 片岡勲. 混相流動の多重スケール性と解析手法. ながれ, Vol. 25, No. 1, pp. 23–30, 2006.

[30] C. Hirt, A. Amsden, and J. Cook. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speeds. *Journal of Computational Physics*, Vol. 14, pp. 227–253, 1974.

[31] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, Vol. 39, pp. 201–225, 1981.

[32] S. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 100, pp. 25–37, 1992.

[33] M. van Sint Annaland, N. Deen, and J. Kuipers. Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method. *Chemical Engineering Science*, Vol. 60, pp. 2999–3011, 2005.

[34] D. Fuster, A. Bagué, T. Boeck, L. Moyne, A. Leboissetier, S. Popinet, P. Ray, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 35, pp. 550–565, 2009.

[35] P. Lin and P. Liu. A numerical study of breaking waves in the surf zone. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 359, p. 239–264, 1998.

[36] T. Yabe, F. Xiao, and T. Utsumi. The constrained interpolation profile method for multiphase analysis. *Journal of Computational Physics*, Vol. 169, pp. 556–593, 2001.

[37] F. Harlow and A. Amsden. Numerical simulation of almost incompressible flow. *Journal of Computational Physics*, Vol. 3, pp. 80–93, 1968.

[38] R. Issa. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, Vol. 62, pp. 40–65, 1986.

[39] 姫野武洋, 渡辺紀徳. 低重力環境における熱流体管理に関する研究（第 1 報，熱流動解析に適した CCUP 法—TCUP 法—の提案）. 日本機械学会論文集 B, Vol. 69, pp. 266–273, 2003.

[40] T. Himeno, T. Watanabe, S. Nonaka, Y. Naruo, and Y. Inatani. Numerical analysis of sloshing and wave breaking in a small vessel by CIP-LSM. *JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering*, Vol. 47, pp. 709–715, 2004.

[41] 姫野武洋. ロケット・宇宙機における推進薬管理. 混相流, Vol. 27, pp. 385–392, 2013.

[42] M. Arienti and M. Sussman. A numerical study of the thermal transient in high-pressure diesel injection. *Journal of Multiphase Flow*, Vol. 88, pp. 205–221, 2017.

[43] M. Davidson and M. Rudman. Volume-of-fluid calculation of heat or mass transfer

across deforming interfaces in two-fluid flow. *Numerical Heat Transfer*, Vol. 41B, pp. 291–308, 2002.

[44] S. Welch and J. Wilson. A volume of fluid based method for fluid flows with phase change. *Journal of Computational Physics*, Vol. 160, p. 662–682, 2000.

[45] J. Schlottke and B. Weigand. Direct numerical simulation of evaporating droplets. *Journal of Computational Physics*, Vol. 227, p. 5215–5237, 2008.

[46] S. Fleckenstein and D. Bothe. A volume-of-fluid-based numerical method for multi-component mass transfer with local volume changes. *Journal of Computational Physics*, Vol. 301, pp. 35–58, 2015.

[47] D. Bothe, M. Kröger, and H. Warnecke. A VOF-based conservative method for the simulation of reactive mass transfer from rising bubbles. *Fluid Dynamics & Materials Processing*, Vol. 7, pp. 303–316, 2011.

[48] 島田直樹, 冨山明男. 化学反応・ガス吸収・熱輸送を伴う気泡塔内気泡流の数値解法. 化学工学論文集, Vol. 31, pp. 377–387, 2005.

[49] 島田直樹, 冨山明男. 流体密度の温度・圧力依存性を考慮した気液二相流の数値解法. 化学工学論文集, Vol. 31, pp. 15–24, 2005.

[50] ANSYS Inc. *ANSYS Fluent User's Guide*, 2019R1.

[51] M. Ersson, A. Tilliander, L. Jonsson, and P. Jönsson. A mathematical model of an impinging air jet on a water surface. *ISIJ International*, Vol. 48, pp. 377–384, 2008.

[52] N. Asahara, K. Naito, I. Kitagawa, M. Matsuo, M. Kumakura, and M. Iwasaki. Fundamental study on interaction between top blown jet and liquid bath. *steel research international*, Vol. 82, pp. 587–594, 2011.

[53] Y. Doh, P. Chapelle, A. Jardy, G. Djambazov, K. Pericleous, G. Ghazal, and P. Gardin. Toward a full simulation of the basic oxygen furnace: Deformation of the bath free surface and coupled transfer processes associated with the post-combustion in the gas region. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 44B, pp. 653–670, 2013.

[54] 安藤誠, 駒形大輔, 髙橋功一, 上野和之. 上吹きジェットによる水浴面動的挙動解析のための 2 段階数値解析法. 鉄と鋼, Vol. 101, pp. 82–87, 2015.

[55] 中村修, 山本哲也, 上野和之, 髙谷幸司. 上吹きジェットによる水浴面挙動のラージエディシミュレーション. 鉄と鋼, Vol. 101, pp. 88–92, 2015.

[56] T.-H. Shih, W. W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, and J. Zhu. A new k-ϵ eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers & fluids*, Vol. 24, No. 3, pp. 227–238, 1995.

[57] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic experiment. *Monthly Weather Review*, Vol. 91, No. 3, pp. 99–164, 1963.

[58] H. Odenthal, J. Kempken, J. Schluter, and W. Emling. Advantageous numerical

simulation of the converter blowing process. *Iron & steel technology*, Vol. 4, pp. 71–89, 2007.

[59] Q. Li, M. Li, S. Kuang, and Z. Zou. Numerical simulation of the interaction between supersonic oxygen jets and molten slag–metal bath in steelmaking BOF process. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 46B, pp. 1494–1509, 2015.

[60] B. Launder and D. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 3, No. 2, pp. 269–289, 1974.

[61] H. Lee and Y. Rao. Rate of decarburization of iron-carbon melts: Part II. a mixed-control model. *Metallurgical Transactions B*, Vol. 13B, pp. 411–421, 1982.

[62] 平居正純, 辻野良二, 向井達夫, 原田俊哉, 大森正直. 転炉における二次燃焼の機構. 鉄と鋼, Vol. 73, pp. 1117–1124, 1987.

[63] 加藤嘉英, J. Grosjean, J. Reboul, P. Riboud. 転炉内のガス流れと熱および物質移動の解析. 鉄と鋼, Vol. 75, pp. 478–485, 1989.

[64] 古賀輝久, 山本和弘, 岸本康夫, 山下博史. 格子ボルツマン法による転炉内二次燃焼の解析. 日本機械学会論文集 B, Vol. 72, pp. 2798–2804, 2006.

[65] M. Ersson, L. Höglund, A. Tilliander, L. Jonsson, and P. Jönsson. Dynamic coupling of computational fluid dynamics and thermodynamics software: applied on a top blown converter. *ISIJ International*, Vol. 48, pp. 147–153, 2008.

[66] G. Tryggvason, R. Scardovelli, and S. Zaleski. *Direct Numerical Simulations of Gas–Liquid Multiphase Flows.* Cambridge University Press, 2011.

[67] M. Wörner. A compact introduction to the numerical modeling of multiphase flows. Technical report, Forschungszentrum Karlsruhe, 2003.

[68] 片岡勲. 気液二相流のモデリングと基礎方程式. 混相流, Vol. 5, pp. 3–21, 1991.

[69] R. Bird, W. Stewart, and E. Lightfoot. *Transport Phenomena, Revised Second Edition.* John Wiley & Sons, Inc., 2007.

[70] J. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics.* Springer, 1999.

[71] I. Jimbo and A. Cramb. The density of liquid iron-carbon alloys. *Metallurgical Transactions B*, Vol. 1993, pp. 5–10, 1993.

[72] W. Lou and M. Zhu. Numerical simulation of desulfurization behavior in gas-stirred systems based on computation fluid dynamics–simultaneous reaction model (CFD–SRM) coupled model. *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 45B, pp. 1706–1722, 2014.

[73] E. Fuller, P. Schettler, and J. Giddings. A new method for prediction of binary gas-phase diffusion coefficients. *Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 58, pp. 19–27, 1966.

[74] G. Smith, D. Golden, M. Frenklach, N. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. Bowman, K. Hanson, S. Song, W. G. Jr., V. Lissianski, and Z. Qin. GRI-Mech 3.0, 1999. http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html, Accessed on Mar. 14th, 2021.

[75] G. Pottlacher. Thermal conductivity of pulse-heated liquid metals at melting and in the liquid phase. *Journal of Non-Crystalline Solids*, Vol. 250–252, pp. 177–181, 1999.

[76] B. Poling, J. Prausnitz, and J. O'Connell. *The Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill Education, 2000.

[77] M. Chase. NIST-JANAF thermochemical tables, fourth edition. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, Vol. Monograph 9, pp. 1–1951, 1998.

[78] B. McBride, S. Gordon, and M. Reno. Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. Technical report, NASA Technical Report, 1993.

[79] J. Brackbill, D. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, Vol. 100, pp. 335–354, 1992.

[80] B. Keene. Review of data for the surface tension of iron and its binary alloys. *International Materials Reviews*, Vol. 33, pp. 1–37, 1988.

[81] B. Magnussen. The eddy dissipation concept: A bridge between science and technology. In *ECCOMAS thematic conference on computational combustion*, Vol. 21, pp. 24–46. Libson, Portugal, 2005.

[82] M. Jemison, M. Sussman, and M. Arienti. Compressible, multiphase semi-implicit method with moment of fluid interface representation. *Journal of Computational Physics*, Vol. 279, pp. 182–217, 2014.

[83] OpenFOAM Foundation. OpenFOAM®—the open source computational fluid dynamics (CFD) toolbox, OpenFOAM Foundation, 2021. http://www.openfoam.org/, Accessed on Sep. 29th, 2021.

[84] J. Roenby, H. Bredmose, and H. Jasak. A computational method for sharp interface advection. *Royal Society Open Science*, Vol. 3, p. 160405, 2016.

[85] M. Ni, R. Munipalli, N. M. P. Huang, and M. Abdou. A current density conservative scheme for incompressible MHD flows at a low magnetic reynolds number. Part II: On an arbitrary collocated mesh. *Journal of Computational Physics*, Vol. 227, pp. 205–228, 2007.

[86] N. Simento, H. Lee, and P. Hayes. Kinetics of decarburisation of levitating liquid iron drops by oxygen. *Steel Research*, Vol. 69, pp. 349–354, 1998.

[87] R. Fruehan and L. Martonik. The rate of decarburization of austenite in CO–CO_2. *High Temperature Science*, Vol. 2, p. 244, 1971.

[88] J. Lamont and D. Scott. An eddy cell model of mass transfer into the surface of a turbulent liquid. *AIChE Journal*, Vol. 16, pp. 513–519, 1970.

[89] M. Hino and K. Ito. *Thermodynamic Data for Steelmaking.* Tohoku University Press, 2010.

[90] V. Ferreira, F. Kurokawa, R. Queiroz, M. Kaibara, C. Oishi, J. Cuminato, A. Castelo, M. Tomé, and S. McKee. Assessment of a high-order finite difference upwind scheme for the simulation of convection-diffusion problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 60, pp. 1–26, 2009.

[91] T. Yamamoto and K. Takatani. Pressure-based unified solver for gas–liquid two–phase flows where compressible and incompressible flows coexist. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 88, pp. 277–295, 2018.

[92] B. van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. *Journal of Computational Physics*, Vol. 14, pp. 361–370, 1974.

[93] S. Chakravarthy. Numerical experiments with the Osher upwind scheme for the Euler equations. *AIAA Journal*, Vol. 21, pp. 1241–1248, 1983.

[94] F. Moukalled and M. Darwish. A high-resolution pressure-based algorithm for fluid flow at all speeds. *Journal of Computational Physics*, Vol. 168, pp. 101–133, 2001.

[95] I. Demirdẑić. A collocated finite volume method for predicting flows at all speeds. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 16, pp. 1029–1050, 1993.

[96] L. Moin and J. Kim. Direct numerical simulation of turbulent flow over a backward-facing step. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 330, pp. 349–374, 1997.

[97] H. Kobayashi, F. Ham, and X. Wu. Application of a local SGS model based on coherent structures to complex geometries. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 29, pp. 640–653, 2008.

[98] D. Spalding. A single formula for the "Law of the Wall". *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 28, pp. 455–458, 1961.

[99] A. Vreman. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Physics of Fluids*, Vol. 16, pp. 3670–3681, 2004.

[100] A. Vreman. Subgrid modeling in large-eddy simulation of complex flows. In *Progress in Turbulence II. Springer Proceedings in Physics*, Vol. 109, pp. 301–304, Berlin, Heidelberg, 2004. Springer.

[101] A. Kasagi. Three-dimensional particle-tracking velocimetry measurement of turbulence statistics and energy budget in a backward-facing step flow. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 16, pp. 447–485, 1995.

[102] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation

of incompressible fluid. *Nuclear science and engineering*, Vol. 123, pp. 421–434, 1996.

[103] J. Martin and W. Moyce. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, Vol. 15, pp. 13–34, 1952.

[104] F. R. Menter, M. Kuntz, and R. Langtry. Ten years of industrial experience with the SST turbulence model. *Turbulence, heat and mass transfer*, Vol. 4, No. 1, pp. 625–632, 2003.

[105] F. Menter and T. Esch. Elements of industrial heat transfer predictions. In *16th Brazilian Congress of Mechanical Engineering (COBEM)*, Vol. 109, pp. 650–660, 2001.

[106] A. F. Hussain. Coherent structures and turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 173, pp. 303–356, 1986.

[107] 森西洋平, 小林直樹, 古賀和樹. 自乗量保存形差分と衝撃波捕獲法の混合スキーム. 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 77, No. 781, pp. 1715–1730, 2011.

[108] G. A. Bres, S. T. Bose, F. Ham, and S. K. Lele. Unstructured large eddy simulations for nozzle interior flow modeling and jet noise predictions. In *20th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*, pp. 2601–2614, 2014.

[109] S. Taniguchi, S. Kawaguchi, and A. Kikuchi. Fluid flow and gas–liquid mass transfer in gas-injected vessels. *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 26, No. 2, pp. 249–262, 2002.

[110] 谷口尚司, 松倉良徳, 菊池淳. ガス吹込み攪拌における乱流流動と気–液間物質移動. 鉄と鋼, Vol. 86, pp. 210–216, 2000.

[111] S. Taniguchi, A. Kikuchi, and S. Kobayashi. Mass transfer between gas and molten iron in the induction furnace equipped with flow controller. In *Materials Transactions*, Vol. 37, pp. 932–937, 1996.

[112] W. Zhao, A. Buffo, V. Alopaeus, B. Han, and M. Louhi-Kultanen. Application of the compartmental model to the gas–liquid precipitation of CO_2-$Ca(OH)_2$ aqueous system in a stirred tank. *AIChE Journal*, Vol. 63, No. 1, pp. 378–386, 2017.

[113] R. Maltby, W. Lewis, S. Wright, A. Smith, and J. Chew. Multiphase CFD modelling of single-use-technology bioreactors for industrial biotechnology applications. In *3rd International Conference on Fluid Flow, Heat and Mass Transfer (FFHMT'16)*. Emerald Group Publishing Ltd., 2016.

[114] P. Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 21, pp. 995–1011, 1984.

[115] Q. L. He and N. Standish. A model study of droplet generation in the BOF steelmaking. *ISIJ International*, Vol. 30, No. 4, pp. 305–309, 1990.

[116] M. J. Luomala, T. M. J. Fabritius, and J. J. Härkki. The effect of bottom nozzle configuration on the bath behaviour in the BOF. *ISIJ International*, Vol. 44, No. 5, pp. 809–816, 2004.

[117] D. Fuster, A. Bagué, T. Boeck, L. Le Moyne, A. Leboissetier, S. Popinet, P. Ray, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 35, No. 6, pp. 550–565, 2009.

[118] X. Li, M. Arienti, M. Soteriou, and M. Sussman. Towards an efficient, high-fidelity methodology for liquid jet atomization computations. In *48th AIAA aerospace sciences meeting including the new horizons forum and aerospace exposition*, pp. 210–226, 2010.

[119] H. Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1996.

[120] 松尾一泰. 圧縮性流体力学 内部流れの理論と解析. 理工学社, 1994.

[121] 社河内敏彦. 噴流工学 –基礎と応用–. 森北出版株式会社, 2004.

[122] 瀬川清. 鉄冶金反応工学 改訂新版. 日刊工業新聞社, 1977.

[123] 田中努, 岡根幸司. 液体へのガスジェット吹付けにおける気・液相互作用. 鉄と鋼, Vol. 74, pp. 1593–1600, 1988.

記号表

α	体積分率 (–)
$\bar{p}^{\mathrm{X}}$	標準気圧単位での化学種 X の分圧 (atm)
β	体膨張係数 (K^{-1})
$\boldsymbol{F}_{\mathrm{s}}$	界面張力による体積力 ($\mathrm{N\,m^{-3}}$)
$\boldsymbol{F}_{\mathrm{v}}$	界面張力による体積力と重力の寄与 ($\mathrm{N\,m^{-3}}$)
$\boldsymbol{j}$	化学種の拡散流束 ($\mathrm{kg\,m^{-2}\,s^{-1}}$)
$\boldsymbol{q}$	熱流束 ($\mathrm{J\,m^{-2}\,s^{-1}}$)
$\boldsymbol{U}$	速度 ($\mathrm{m\,s^{-1}}$)
ΔH	エンタルピー変化 ($\mathrm{J\,mol^{-1}}$)
Δt	時間刻み (s^{-1})
η	脱炭反応効率 (–)
κ	界面の曲率 (m^{-1})
λ	熱伝導率 ($\mathrm{W\,m^{-1}\,K^{-1}}$)
$\langle\rangle_{\mathrm{f}\to\mathrm{c}}$	セル面中心点からセル中心点への補間
$\mathcal{R}$	化学反応による質量変化速度 ($\mathrm{kg\,m^{-3}\,s^{-1}}$)
$\varPhi_{\mathrm{f}}^{n}$	セル面を通過する体積流量 ($\mathrm{m^3\,s^{-1}}$)
$\varDelta_{\mathrm{g}}$	界面を含むセルにおける気相の重心点と界面との距離 (m)
$\mathrm{D}/\mathrm{D}t$	物質微分 (s^{-1})
Pr	プラントル数 (–)
R	気体定数 ($\mathrm{J\,K^{-1}\,mol^{-1}}$)
$\mathrm{R_a}$	気体定数 ($\mathrm{m^3\,atm\,K^{-1}\,mol^{-1}}$)
Sc	シュミット数 (–)
μ	粘性係数 (Pa s)
ν	動粘性係数 ($\mathrm{m^2\,s^{-1}}$)
Ω	セル空間
ρ	密度 ($\mathrm{kg\,m^{-3}}$)
σ	界面張力係数 ($\mathrm{N\,m^{-1}}$)
$\sum_{\mathrm{f}}$	セル面にわたる総和
$\boldsymbol{\tau}$	粘性応力 (Pa)
A	界面の面積 (m^2)

C_p 定圧比熱 ($\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$)

Co 最大クーラン数 (–)

D 拡散係数 ($\mathrm{m^2\,s^{-1}}$)

G 重力ポテンシャル ($\mathrm{m^2\,s^{-2}}$)

H 相識別関数 (–)

h 比エンタルピー ($\mathrm{J\,kg^{-1}}$)

K 単位質量あたりの運動エネルギー ($\mathrm{m^2\,s^{-2}}$)

k 物質伝達係数 ($\mathrm{m\,s^{-1}}$)

M モル質量 ($\mathrm{kg\,mol^{-1}}$)

N 化学種のモル流束 ($\mathrm{mol\,m^{-2}\,s^{-1}}$)

p 圧力 (Pa)

Q 化学反応による熱発生速度 ($\mathrm{J\,m^{-3}\,s^{-1}}$)

$r^{\mathrm{CO_2}}$ 単位面積あたりの $\mathrm{CO_2}$ の消費速度 ($\mathrm{mol\,m^{-2}\,s^{-1}}$)

R_g 混合ガスの気体定数 ($\mathrm{J\,kg^{-1}\,K^{-1}}$)

s $\mathrm{CO_2}$ の解離吸着反応の反応速度定数 ($\mathrm{mol\,m^{-2}\,s^{-1}\,atm^{-1}}$)

t 時刻 (s)

V セル体積 ($\mathrm{m^3}$)

v 拡散体積

W モル質量 ($\mathrm{kg\,kmol^{-1}}$)

Y 化学種の質量分率 (–)

下付き添字

f セル面での量

g 気相に関する量

l 液相に関する量

l–g 液相–気相間の相互作用に関する量

t 乱流に起因する量

$\mathrm{g \to int}$ 気相のバルクから流体速度で移動する界面へ向かう量

上付き添字

$*$ 気液界面に吸着した量

X 化学種 X に関する量

† 気液界面の量

n 時刻ステップ

関連発表文献

論文（英文）

1. Pressure-based unified solver for gas–liquid two-phase flows where compressible and incompressible flows coexist
   T. Yamamoto and K. Takatani, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Volume 88, Issue 6, (2018), DOI: 10.10002/fld.4666.
2. Coupled Simulation of Flow and Chemical Reaction with Finite Reaction Rate for Decarburization of Molten Iron using Gas Jet of Carbon Dioxide
   T. Yamamoto, T. Omori, and T. Kajishima, in press, ISIJ International.

講演論文（国内学会）

- 圧縮性・非圧縮性の気液二相流に対する圧力ベースの統一解法
  （非構造格子における解法の開発）
  山本哲也，髙谷幸司
  第 30 回数値流体力学シンポジウム講演論文集，(2016-12)，A04-4.

謝辞

本研究をまとめるにあたり，大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻　梶島 岳夫教授には，社会人として博士課程へ入学した時から，6 年間に渡り，終始丁寧なご指導・ご助言をいただきました．ここに心より御礼申し上げます．

大阪市立大学大学院 工学研究科 機械物理系専攻　大森 健史准教授には，6 年間に渡り，終始適切なご助言，温かい励ましをいただきました．ここに心より御礼申し上げます．

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻　田中 敏嗣教授，芝原 正彦教授には，ご多忙の中，快く副査をお引き受けいただき，本論文に対する懇切なご校閲，ならびに的確なご指導をいただきました．あらためて御礼申し上げます．

本研究の大部分は，著者が日本製鉄株式会社において行ったものであります．本研究をまとめるにあたり，多大なご配慮をいただきました日本製鉄株式会社 先端技術研究所長 野村 誠治博士，先端技術研究所 数理科学研究部長 西岡 浩樹博士に御礼申し上げます．社会人として，大阪大学への入学の機会を与えていただきました濱荻 健司氏に御礼申し上げます．本研究を進めるにあたり，髙谷 幸司博士，田村 鉄平博士と数多くの貴重な議論をさせていただきました．ここに御礼申し上げます．本研究をまとめるにあたり，岡田 信宏博士，沼田 光裕博士には，適切なご助言をいただきました．謹んで感謝の意を表します．また，終始温かい励ましをいただきました田中 正博博士に御礼申し上げます．

最後に，私に高等教育を受けさせてくれた両親，研究に専念できるように支援してくれた妻彩絵，心の支えとなった娘 一葉，茜に深く感謝いたします．